2000 年上海大学博士学位论文 5

玻色-爱因斯坦凝聚体形成的动力学和光学性质研究

作者：闫珂柱
专业：无线电物理
导师：谭维翰
周世平

上海大学出版社

责任编辑　黄冬苹
封面设计　王悦生

SHANGHAI UNIVERSITY DOCTORAL DISSERTATION (2000)

THE STUDIES ON KINETICS OF FORMATION AND OPTICAL PROPERTIES OF BOSE-EINSTEIN CONDENSATE

Candidate: Yan Kezhu
Major: Radio Physics
Supervisors: Prof. Tan Weihan
Prof. Zhou Shiping

ISBN 7-81058-275-5

ISBN 7-81058-275-5/G·049
全套定价: 160.00 元
本册定价: 10.00 元

2000年上海大学博士学位论文

玻色-爱因斯坦凝聚体形成的动力学和光学性质研究

作　者：闫珂柱
专　业：无线电物理
导　师：谭维翰　周世平

上海大学出版社
·上　海·

Shanghai University Doctoral Dissertation (2000)

The Studies on Kinetics of Formation and Optical Properties of Bose-Einstein Condensate

Candidate: Yan Kezhu

Major: Radio Physics

Supervisors: Prof. Tan Weihan

Prof. Zhou Shiping

Shanghai University Press

• Shanghai •

上 海 大 学

本论文经答辩委员会全体委员审查，确认符合上海大学博士学位论文质量要求。

答辩委员会名单：

主任：	林福成	研究员，中科院上海光机所	201800
委员：	王祖赓	教　授，华东师范大学	200062
	鲍家善	教　授，上海大学	200072
	沈文达	教　授，上海大学	200072
	李春芳	教　授，上海大学	200072
导师：	谭维翰	教　授，上海大学	200072
	周世平	教　授，上海大学	200072

评阅人名单:

彭堃墀	教　授，山西大学	030006
林尊琪	研究员，中科院上海光机所	201800
李师群	教　授，清华大学	100084

评议人名单:

林福成	研究员，中科院上海光机所	201800
王祖赓	教　授，华东师范大学	200062
刘正东	教　授，浙江大学	310027
周国生	教　授，山西大学	030006

答辩委员会对论文的评语

本论文着重就 BEC 凝聚体的形成和有关性质作了理论上的研究，而 Bose-Einstein 凝聚态是当前世界上最新的热门基础研究方向之一，由此发展得到的原子激光是有重要的学术价值和潜在应用前景。作者在导师的指导下，在 BEC 理论研究中作了系统深入的工作，得到了具有新意的研究结果。①论文首先发展了一种 NLSE 数值求解方法，把凝聚态和非凝聚态放在一起进行统计平均并获得 Bose 凝聚条件；②准确求解在吸引相互作用下的 N 原子体系 Bose 凝聚并研究了宏观量子体系的隧道效应；③根据 BEC 动力学模型和主方程，应用母函数方法求得主方程的解和原子激光的增率并得出原子激光的超泊松统计分布；④求得了一维箱势中具有吸引相互作用的中性原子系统的解析解；⑤Bose 凝聚体的受激和自发辐射的增强。作者发表了多篇有价值的学术论文，具有坚实的基础和广阔的专业知识，并能在研究中获取创造性成果，有很好的理论研究能力。

本论文写作层次分明，条理清楚，文笔流畅，物理问题阐述透彻明了，数学推导严谨，数值模拟分析能力强，达到博士论文水平，是一篇优秀的博士论文。作者在答辩中叙述清楚，回答问题正确。

答辩委员会表决结果

经答辩委员会表决，一致同意闫珂柱同志通过论文答辩，并建议授予博士学位。

答辩委员会主席：**林福成**

2000 年 11 月 20 日

摘　要

玻色-爱因斯坦凝聚（BEC）是一类涉及物理学的很多领域的普遍物理现象. 1924 年爱因斯坦预言了当温度低于临界温度时服从玻色统计的理想中性原子气体的凝聚现象. 1995 年碱金属原子 ^{87}Rb , ^{23}Na 和 ^{7}Li 通过激光冷却、静磁阱与蒸发冷却等技术实现了近理想气体的BEC; 1998 年实现了氢原子的BEC. 这种上万乃至上百万原子构成的宏观量子系统，以相干的方式在演变. 由于长的德布罗意波长，原子完全失去了孤立粒子的特征，BEC 将量子现象带到了宏观尺度. 近几年这种新物态特性的研究有广泛和迅猛的进展.

在阅读了许多有关 BEC 的理论和实验文献的基础上,我们主要在理论上做了一些工作. ①求得了一维箱势阱中有排斥和吸引相互作用情形中性原子 BEC 波函数和能量本征值的解析解,相对于无相互作用体系，排斥体系的能级升高了，原子分布趋于分散；吸引体系的能级降低了，原子分布趋于集中. ②给出了求解有原子间相互作用时中性原子 BEC 的方法, 估算了这种非理想气体 BEC 的临界温度随原子间相互作用大小和原子密度的变化情况，得出排斥相互作用增大, 将使得激发态能容纳的原子数减少，临界温度升高. ③给出了一种非线性定态薛定谔方程(NLSE)数值求解方法，即对非线性微分方程进行数值积分时，调整波函数的边界值 $\Phi(0)$ 和本征值 β ，使 $\Phi(x)$ 在 $x\to\infty$ 时收敛于零和归一化条件都得到满足. 并用这种方法求解了简谐

势阱中中性原子 NLSE 的基态和激发态的能量本征值 β_n 和波函数. 讨论了参数 $\Phi'(0)$ ， β 的确定与积分收敛及波函数归一化的关系. ④三维球方势阱和简谐势阱中具有吸引相互作用原子体系 NLSE 的数值本征解其特性是类似的，即原子的空间分布随相互作用的增强而被连续压缩，以及凝聚原子数随能量本征值变化的双稳态曲线. 临界点将本征态分为亚稳的凝聚态和不稳的稠密态，并给出与实验报道相符的吸引 BEC 所能包含的最大原子数 N_c. 在此基础上我们又给出了一个严格可解的宏观量子隧道模型，计算了从亚稳凝聚态到塌缩态的宏观量子隧道速率，分析了吸引 BEC 的稳定性. ⑤根据最近的 BEC 的动力学模型和主方程，用母函数方法求得玻色凝聚体主方程的解，并计算了凝聚体形成的增率与起伏，增率曲线存在一平台，而平台的粒子数起伏则是超泊松分布的. 初始增率 γ 随最终平衡原子数 n_{eq} 的增加而逐步减小，与实验结果大体上一致. ⑥给出 N 原子辐射几率的准确求解模型，求得 BEC 自发与受激跃迁几率的增强因子正比于 $\lambda^3/(2\pi^2)$ (λ 为原子的跃迁波长)体积内的原子数 n ，并依赖于德布罗意波长 λ_B. 当德布罗意波长 λ_B 与原子的跃迁波长 λ 之比 $\xi_B = \sqrt{2\pi}\,\lambda_B/\lambda = 2.45$ 时，辐射速率的增强因子 γ' 达到它的极大值 $\gamma' = 1.453$. 增强因子 γ' 超过极大之后随温度的进一步降低而减小，当 $kT \to 0$ ， $\xi_B \to \infty$ 时，增强因子 γ' 趋于零. 另一方面，当 ξ_B 很大时，能级的 Lamb 移位的修正 δ' 趋于一个有限值 -1.0 .

关键词　玻色-爱因斯坦凝聚、非线性定态薛定谔方程、原子激光，光学性质

Abstract

Bose-Einstein condensation (BEC) is a ubiquitous phenomenon relating to many fields in physics. In 1924, Einstein predicted the phenomenon of condensation for an ideal gas of neutral atoms obeyed Bose-statistics under the temperature below critical value. Up to 1995, this idea were demonstrated in experiment of near-perfect gas of alkali atom ^{87}Rb , ^{23}Na and ^{7}Li by loading laser-cooled atoms into a magnetic trap and successive cooling by evaporating, the BEC of atomic hydrogen was observed in 1998. A million or so atoms in the macroscopic quantum system are all evolving in a coherent way. They have completely lost their individual identity. The quantum phenomenon is brought in macroscopic scale by BEC. The extensive studies on the properties of a new state of matter have rapid developments in recent years. Based on a lot of the references relating to the experiment and the theory of BEC we have done some theoretical work in the following respects. ① An analytic solution of the energy eigenvalue and wave function of neutral atoms with repellent and attractive interactions in a box potential are obtained. Compared with the system without interactions, with increase of interactions or number of atom, the energy levels of repellent system increases and the distributions of atoms approach decentralization, whereas the energy levels of attractive system decreases and the distributions of atoms approach centeralization. ② A general approach to the BEC of neutral atoms with interaction is presented. The critical temperature of imperfect gas BEC is estimated. With the increasing of interaction the number atom hold in exited states decreases and the critical temperature increases. ③ We present a numerical method to solve the stationary nonlinear Schrödinger equation (NLSE) with an external potential, by adjusting eigenvalue β and boundary value of wave function $\Phi'(0)$, such that the conditions of convergence and normalization of the wave function being satisfied simultaneously. We discuss the questions of convergence and

normalization of NLSE wave function. The accuracy of calculation is analyzed. ④ The numerical solutions of neutral atoms with attractive interaction in a harmonic trap and a spherically symmetric well potential of depth infinite are calculated. And the characteristics of two solutions are analogous on the compressed atom spatial distributions and the bistability curves of condensate atoms versus the energy eigenvalues. The critical point divides the eigenstates into metastable condensate and dense state, and gives the maximum number of atoms with which an attractive BEC can hold, and which is in agreement with the experiment on the whole. Based on this we present an exactly solvable model for macroscopic quantum tunneling of BEC with attractive interaction, and calculate the rate of macroscopic quantum tunneling from a metastable condensate state to the collapse state and analyze the stability of the attractive BEC. ⑤According to recent quantum kinetic theory and using the generating function method to solve the master equation of BEC, we evaluate the growth rate, statistical fluctuation of condensate atoms. It is obtained that there is a plateau in the growth rate curve and a super-Poissonian distribution of statistical fluctuation. It is observed that the growth rate γ decreases progressively with the increase of the final equilibrium value of condensate n_{eq}, which agrees with the experimental result on the whole. ⑥ An exactly solved model for the emission by N atoms is presented, the spontaneous and induced transition rates are enhanced by a factor which is proportional to the number of atoms n in the volume $\lambda^3/(2\pi^2)$ (λ is the transition wavelength of atom) and dependent on the de-Broglie wavelength λ_B in a more complicated way. The enhancement factor γ' attains its maximum $\gamma'=1.453$ at $\xi_B = \sqrt{2\pi}\,\lambda_B/\lambda = 2.45$, then decays to zero for large ξ_B; and the energy level Lamb shift factor δ' approaches to -1.0 for large ξ_B.

Key words Bose-Einstein condensation, nonlinear Schrödinger equation, atom laser, optical property

目 录

第一章 绪论

玻色-爱因斯坦凝聚实际是一类涉及物理学的很多领域的普遍的物理现象，包括原子分子物理、量子光学、统计物理和凝聚态物理等. 1995 年美国的 JILA 和 MIT 小组分别用碱金属原子 ^{87}Rb 和 ^{23}Na 通过激光冷却、静磁阱与蒸发冷却等技术实现了 BEC[1,2]，Rice 大学的研究小组也报道了超冷 ^{7}Li 原子进入量子简并区域的实验现象[3]，1998 年实现了氢原子的 BEC[4]. 这种上万乃至上百万原子构成的宏观量子系统，以相干的方式在演变. 由于长的德布罗意波长，原子完全失去了孤立粒子的特征，BEC 将量子现象带到了宏观尺度. 近几年这种新物态特性的研究有广泛和迅猛的进展. 这一物理现象的研究会对将来的物理学产生深远的影响.

1.1 BEC 研究的简单回顾[5]

1924 年 6 月 24 日，30 岁的印度物理教师玻色(S.Bose)寄送一份手稿给爱因斯坦，并附信说："尊敬的先生，我冒昧地送上所附手稿请您审阅. 我迫切想听到您的意见. 我试图不依赖经典电动力学来推导普朗克(黑体辐射)定律的系数 $8\pi\nu^2/c^3$，办法是假定相空间最基本区域的体积为 h，我的德文不足以翻译此稿. 如果您认为此文值得发表并安排在《(德国)物理杂志》上，

我将不胜感激"[6]. 爱因斯坦亲自把手稿译成德文，送去发表[7]，并在文末加注说："我以为对普朗克公式的推导乃是一项重大进步. 所用方法也将导致理想气体的量子理论，我将另行阐述." 爱因斯坦接着发表了文章[8]，其中第二篇里提出了原子将"凝聚"的大胆预言.

原来爱因斯坦在 1905 年关于光电效应的著名论文中，第一次把普朗克的"能量量子"概念推广到光，虽然光子一词直到 1926 年才出现. 玻色 1924 年推导的关键，是用光子状态的计数，而不是光子计数. 爱因斯坦立即把状态计数的思想用到组成理想气体的原子，指出遵从这种统计的气体将在一定的转变温度下发生凝聚：部分原子将落入动能为零的最低量子态，其他原子则组成"饱和理想气体". 当时两种量子统计的存在、统计同多粒子波函数在粒子交换下对称性的关系，以及对称和自旋的关系等等，都尚未认识. 难怪爱因斯坦曾把电子气体也列入可能观察此种凝聚的对象之一. 当时相变也没有被作为一类深刻的物理问题，人们自然未意识到 BEC 乃是首次由统计物理学推出的一种相变现象.

事实上人们也不知道到哪里去寻求这类凝聚现象. 直到 30 年代，伦敦（F. London）才指出，超流和超导现象可能是 BEC 的表现. 不过这两类现象都发生在强相互作用的体系中. 后来才知道，超流液氦中只有约 10%的原子凝聚. 超导与 BEC 的关系要经过电子配对，涉及更复杂的相互作用. 由于粒子间强相互作用而导致 BEC 相变的纯量子统计特性复杂化. 很难看成是纯的 BEC. 这种情况促使人们去寻求在稀薄的、弱相互作用下的玻色气体中实现 BEC. 1959 年有人提出自旋极化氢原子气体可能是 BEC 的候选者[9]. 1980 年，另一种候选者——氧化亚铜中

的激子被提出[10]. 经过 10 多年的努力，1993 年在实验上观察到了激子的 BEC 现象[11]. 可是由于复杂的相互作用过程，BEC 特性仍然得不到很好的研究. 80 年代中期，激光冷却和捕陷原子的研究已得到长足的进步，几个研究小组提出了冷却的碱金属原子可以形成只有很弱相互作用的 BEC. 在不断解决实现 BEC 的一系列技术难题后，1995 年碱金属原子的 BEC 终于被实验实现了. 1998 年自旋极化氢原子气体的 BEC 也被观察到[4]. 这使人们对量子简并气体的 BEC 研究进入了一个全新的阶段.

1.2 实现 BEC 的相关技术

1.2.1 激光冷却和囚禁技术[12]

根据共振光偏转原子束的原理，当光子被原子吸收后，便获得动量 $\hbar k$，然后以自发辐射或受激辐射形式释放光子，回到基态. 如果以自发辐射形式辐射出去，其辐射方向在 4π 立体角内均匀分布，给予原子的平均动量为零，故原子获得所吸收光子的动量 $\hbar k$. 只要激光频率 ω_L 相对于原子跃迁的频率 ω_0 为红移 $\omega_L-\omega_0<0$，在激光作用下的原子，会由于 Doppler 效应被减速，被致冷，即 v, v^2 随作用时间 t 的增加而下降. 但这只是受到迎面而来的激光辐射压力作用的结果. 如果是受到正反方向传播的激光作用，这原子将在传播方向例如 x 轴方向被减速. 如果是采用 6 个光束沿 x, y, z 正反方向作用于原子，则原子将被禁锢在 6 束光作用的小区域内，又考虑到原子的速度扩散，原子很像是在一带有粘性的液体即光学粘胶(Optical molasses)中运动. 另外，当激光的偏振随空间坐标变化，亦即存在偏振梯度时，对与之相互作用的原子呈现出阻力，而且这时的阻尼系数当原

子的速度$v \to 0$时，几乎与光强无关[12]. 通过这种激光冷却和囚禁技术可获得大量的高密度的超冷原子，数目为$\sim 10^{10}$，密度为$10^{11}-10^{12}\ cm^{-3}$，温度为几十μK.

1.2.2 静磁阱技术[13]

按照麦克斯韦的电磁理论，具有固有磁矩的粒子可以被囚禁在磁场的极小处，不均匀磁场B对磁偶极矩μ的作用力为：$F_B=-\nabla(\mu\cdot B)$. 可用静磁阱来囚禁具有磁偶极矩的原子. 结构最简单的静磁阱是反向亥姆霍兹线圈形成的四极阱，其中心处场强为零. 当线圈间距等于其半径的 1.25 倍时，沿径向的阱深与沿轴向的阱深相同，其特点为囚禁力强和囚禁时间长[14]. 由于这种静磁阱的磁场强度在磁场中心处为零，在其附近磁场方向变化剧烈，原子经过磁场零点时，它的自旋取向可能发生变化，对于自旋取向反转的原子，势场零点为势能最高点，原子会逸出阱外. 由于存在上述的“漏洞”，严重地限制了阱中原子密度的增加. Cornell 等人利用时间旋转势阱(time orbiting potential, TOP)来堵此“漏洞”[15]，即在一个大的球四极场的基础上叠加一个以几 MHz 旋转的小的横向磁场而形成的磁阱. 旋转频率的选择原则是：旋转频率足够低，使原子自旋取向能够缓慢地跟随它所在点的磁场方向变化；但对原子的空间运动来说，旋转频率又足够高，以致于原子在空间的运动主要由势能的时间平均来决定. 加上小的磁场后，使四极场势阱随时间在空间旋转，其时间平均为一个椭球面简谐势阱，势阱最小点附近非零，且变化平滑. 因而自旋取向反转的问题大大减少. MIT 的 Ketterle 等人则利用聚焦于磁场零点的高斯光束所产生的排斥势来堵此漏洞[2]，这个光学塞由一束 Ar^+ 激光束(514nm)形成，

其功率为 3.5mW，束腰为 30μm，它在原点使^{23}Na 原子的基态产生 7MHz 的光频移势，原子会受到排斥力的作用而无法进入磁场零点附近（激光强度最大）的区域，于是极大地抑制了原子通过漏洞逃逸出去的几率. 同时，由于所用的激光频率远离钠原子的共振频率，克服了由共振光子散射而引起的加热效应.

另外还有，用永久磁铁以 “Ioffe” 组态形成的静磁阱[16]和利用直流电磁铁组成的静磁阱即 “Cloverleaf ”阱[17]，可有效地解决普通四极磁阱中心存在的 “原子泄漏 ” 问题.

1.2.3 蒸发冷却技术[13]

蒸发冷却是有选择地把磁阱中能量较高的原子释放出来，然后剩下的原子通过弹性碰撞重新达到温度更低的热平衡，如此反复不断降低原子气体的温度. 在实现 BEC 的过程中，蒸发冷却是由一个射频磁场来完成的[18]. 在磁阱中，能量较大的原子可达到磁场较强的地方，产生的塞曼分裂也较大. 可选择射频场频率，使这些原子从囚禁自旋态（例 $m=+1$ ）跃迁到非囚禁的自旋态（ $m\neq+1$ ）而逸出磁阱，通过把射频场频率慢慢变低，迫使更多的能量较高的原子逸出磁阱. 于是，阱中的原子密度和弹性碰撞几率增加，温度变低，最终的温度和相空间密度取决于最后的射频场频率.

1.2.4 BEC 检测技术[13]

目前观测 BEC 的形成多采用共振吸收成象技术[19]，用这种技术可以确定原子的数目、密度、温度以及原子的空间分布. 其具体过程为：突然关闭势阱，让发生凝聚的原子云自由扩散，然后在不同的延迟时刻用共振脉冲光来探测. 由于原子对共振

光的吸收，在探测光中会产生阴影区，由 CCD 装置对透射光成象，对图象进行数值化处理，可以得到原子云在每一点的光学厚度．对由此获得的一系列飞行时间 (time-of-flight, TOF) 图象进行逐点校正，以修正由探测光的偏振度和饱和效应引起的偏差，可以得到扩散原子云的二维速度分布．它们包含着原子的许多热力学信息，如：分布曲线下所包围的面积，正比于总的原子数目；在零速度附近出现的窄特征峰，其峰值曲线下所包围的面积的积分正比于处于体系基态的原子数目；从扩散原子云的平均半径和扩散时间可以得到原子的平均扩散速度和特征能量等特征参量．冷原子温度常常通过飞行时间的测量来完成，用共振荧光方法测量距冷原子团中心一定距离处的荧光强度的时间演化，可以得到冷原子的速度分布，由此推出温度[20]．由于利用共振光探测，原子会强烈地散射共振光子，从而引起对原子的加热效应，因此这种共振吸收成象技术对形成的 BEC 有一定破坏性．

1.3 碱金属原子的 BEC 实验

1.3.1 铷原子的 BEC 实验

JILA 小组首次实现碱金属原子 BEC 实验[1]的核心装置是磁光阱 (MOT: magneto-optical trap) 方柱形玻璃容器室，两个平行反向电流线圈产生非均匀静磁场，零场强点正好在气室中心；三对两两相对的激光束沿三个坐标轴交会在气室中心，激光的频率略低于铷原子的所用跃迁频率（“红”失谐）．激光线宽小于 1MHz，气室真空度达 $\sim 1.33\times10^{-9}$ Pa．它们利用磁光阱从极低气压的铷蒸汽中收集和冷却原子，然后通过调节磁场

梯度和激光频率，把原子云进一步压缩并冷却，接着关掉所有激光，在 1ms 时间内加上形成 TOP (time orbiting potential) 阱所需的四极磁场和旋转磁场，继续用 TOP 阱囚禁原子，再用射频场对原子样品进行蒸发冷却. 在 70s 时间内，射频场的频率和旋转场强度都减小，射频场的频率变化时，水平截面内原子速度分布出现明显变化，BEC 开始发生在射频场频率处于 4.25~4.23MHz 之间的时候. 当射频场频率大于 4.23MHz 时，原子速度分布为平滑的单一高斯分布；当射频场频率等于 4.23MHz 时，原子速度分布中心开始出现一个尖锐的峰；当射频场频率小于 4.23MHz 时，原子速度分布曲线出现两部分：一部分为宽的平滑的高斯分布，对应于正常相原子；而另一部分为位于中心的窄峰，对应于凝聚相原子. 当射频场频率为 4.25MHz 时，原子云中有 2×10^4 个原子，密度为 2.6×10^{12} cm^{-3}，温度为 170 nK.

1.3.2 钠原子的 BEC 实验

MIT 小组在"光学塞孔"中实现 Na 原子的 BEC 过程如下[2]：经激光冷却后的 Na 原子装入到磁场梯度为 130G/cm 的"光学塞孔"磁阱中，峰值密度约有 $10^{11}cm^{-3}$，温度 ~ 200 μK. 被囚禁的原子通过射频场进一步蒸发冷却. 在 7s 内，射频场频率从 30MHz 变化到 1MHz，同时磁场梯度增加至 550G/cm，然后降低到 180G/cm. 凝聚态的观测是先用共振于 $F=1 \rightarrow F=2$ 的激光将原子抽运到 $F=2$ 态，10μs 之后用调谐于 $F=2 \rightarrow F=3$ 的激光进行吸收成象，探测光成象于 CCD 装置，当温度高于 15μK 时，因禁的原子云呈椭圆形. 当温度低于 15μK 时，原子云在势能最低点处分离成两个凹槽；

当射频频率 ν_{rf} 小于 0.7MHz 时,可观察到速度分布对称性发生明显变化，大于此频率时，分布是球形的，如同热运动的原子云，低于此值时，速度分布包括一个椭圆形核. 当射频频率进一步减小时，其亮度增加，球形部分变暗. 这个椭圆形原子云即为发生凝聚的部分，球形原子云对应非凝聚部分，椭圆图形是由于磁阱中囚禁势的不对称引起的. 低于此跃迁频率时，出现双重速度分布，窄分布对应凝聚部分，宽分布对应非凝聚部分，凝聚部分的速度分布不再是高斯型，两重分布的宽度不一样. 由 TOF 图象，得到原子数目 $N_c=5\times10^5$，峰值密度 $n_c=4\times10^{14}\,cm^{-3}$，凝聚态寿命大约 1s，温度 $T=2\,\mu K$.

在 "Cloverleaf" BEC 实验过程如下[21]：利用塞曼减速和暗 SPOT 阱，在 2s 内，有 $(5-9)\times10^9$ 个原子被囚禁，密度是 $5\times10^{11}\,cm^{-3}$，在 1s 内快速关闭冷却光，打开 "Cloverleaf" (阱轴向曲率最大值是 $125Gcm^{-2}$，径向梯度 $170Gcm^{-1}$，轴向偏压场 100G). 原子进入阱后，得到处于 $F=1, m_F=-1$ 态的原子数目大约 2×10^9 个，峰值密度 $6\times10^{10}\,cm^{-3}$，然后减小偏压场到 1G，接着用射频诱导进行蒸发冷却. 射频频率从 30MHz 变到 1MHz 的时间是 15-26s . 在射频场关闭后，原子在阱中热平衡时间大约是 100ms，最后关闭磁阱，对原子云进行成象. 从原子云的 TOF 图象可以看到，原子云从最初 "铅笔状" 开始扩散，非凝聚部分均匀扩散，凝聚部分主要沿 X 轴扩散. 飞行时间和 CCD 成象反映了原子云的速度分布. 在小于或等于相变温度时，正常部分速度分布是均匀的；在温度 $T=2\,\mu K$ 时，得到凝聚态峰值密度 $n_c=1.5\times10^{14}\,cm^{-3}$，凝聚态原子数目 $N_c=5\times10^6$，是光学塞孔阱中数目的 10 倍. 从相互作用能与

凝聚原子数目的对应关系曲线上看出，处于凝聚相的原子的扩散独立于正常成分，表明正常成分的扩散不影响凝聚态的扩散. 在射频场工作状态下，凝聚态的寿命为 20s；去掉射频场时，寿命减小到 1s. 这是由于背景气体掠入射碰撞激发态原子，当凝聚态原子热运动能量超过势阱深度时，原子逸出阱外.

最近的钠原子在不对称简谐势阱（$\omega_x=\omega_y=2050$ rad/s, $\omega_z=170$ rad/s）中的 BEC 实验[22]，其柱密度分布如图 1-1 所示. 给

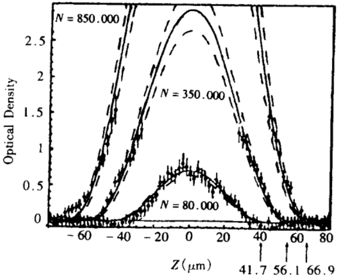


图 1-1 钠原子在不对称简谐势阱中的 BEC 柱密度分布[22]

（$\omega_x=\omega_y=2050$ rad/s，$\omega_z=170$ rad/s）

实线：凝聚原子数分别为 $N_0=8\times10^4$，3.5×10^5，8.5×10^5 时平均场的计算结果. 相应于峰值处的柱密度分别为 422、1072、和 1826 atoms/μm². 虚线为 N_0 改变 ±10% 后的计算结果. 箭头给出 z 方向上 Thomas-Fermi 表面位置. 实验数据实心圆圈上的竖线表示统计误差

出了磁阱中钠原子 BEC 的空间分布的定量测量，图中曲线表明：实验结果与平均场理论很好地一致；可在 1%以内确定凝聚体的 Thomas-Fermi 表面.

1.3.3 锂原子的 BEC 实验

Rice 大学的 R.G.Hulet 等人报道了锂原子进入同一量子简并区的实验现象[3]，其实验过程如下：锂原子首先利用塞曼减速器减速，然后进入 Ioffe 阱中心区域. 三对调谐于 $2S_{1/2}$, $F=2$, $m_F=2$ 到 $2P_{2/3}$, $F=3$, $m_F=3$ 跃迁频率的激光相向沿轴向入射到阱中心处. 通过多普勒冷却，锂原子温度降到 200 μK，峰值密度 $\sim 7\times10^{10}\,cm^{-3}$，接着利用微波场进一步蒸发冷却. 在蒸发冷却 5 分钟后，气体发生相变，产生 BEC，温度 $T=300\,nK$，原子数目 $N=1\times10^5$. 一个低于原子共振频率，失谐为 12~18MHz 的高斯光束被作为探测光来测量原子的数目和温度. 由于阱的弹性常数是非对称的，图象呈椭圆形状，他们在实验上发现，当 $\dfrac{N}{N_c}>1.5$ 时，围绕吸收峰值处出现一个"光晕"，这是由于探测光与形成凝聚的原子发生了衍射效应；而当 $\dfrac{N}{N_c}<1$ 时，衍射效应消失. 后来，他们通过相衬成像技术测量了形成凝聚的锂原子数目[23]，如图 1-2 所示，观察到量子简并区的条件是在原子数 N 为 6800~135000 和温度 T 为 120~350 nK，实验上确定的简并区的半径 R 为 2.5~5 μm. 在所有情况下凝聚数 N_0 都是很小的，$R=5\,\mu m$ 时求得的 N_0 约为 1300，这个值当 $R=4\,\mu m$ 时减小到 1000 和 $R=2.5\,\mu m$ 时的 650.

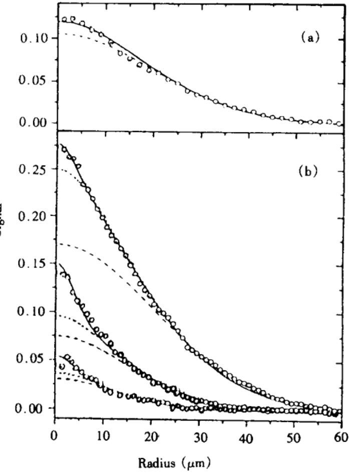


图 1-2　捕陷超冷锂原子气体的空间分布[23]

竖直轴表示信号强度相对于探针强度的大小，数据点由所测量的图象信号得出，实线是按玻色-爱因斯坦统计分布所计算的结果．短虚线是将凝聚原子去掉同样分布的计算结果．长虚线是经典(高斯)分布的计算结果．考虑到成像系统的分辨率(假定是 4 μ m 的有效分辨率)的限制．在上述曲线的计算中包括与高斯函数卷积．在图(a) 为探针失谐 +191MHz．温度在 309 nK．9.0×10^4 个原子的分布．凝聚原子数在~1 的量级．表明气体刚接近简并．图(b)：探针失谐 −130 MHz．按信号由强到弱依次对应的总原子数和温度分别为 1.01×10^5 和 304 nK、2.6×10^4 和 193 nK、6.6×10^3 和 122 nK．它们相应的凝聚原子数分别为 500、810 和 270.

1.3.4 自旋极化氢原子的 BEC 实验

随着激光冷却和约束原子的技术向前推进，再加上蒸发冷却与磁阱约束，终于实现了中性原子氢的玻色－爱因斯坦凝聚. MIT的Kleppner小组最早研究氢原子的BEC，在1991年就已获得100μK的低温和8×10^{13} cm^{-3}原子密度[24]，该密度所对应的临界温度为30μK，应该说离实现BEC条件不远了，可是由于一对自旋反平行的氢原子在第三个氢原子的碰撞下会复合成氢分子 $H\uparrow+H\downarrow\rightarrow H_2+4.6$ eV. 复合速率正比于密度的三次方，从而限制了密度的增加；发热则妨碍进一步降温，这些均在很大程度上推迟了氢原子BEC的实现. 在经过几年的努力后，MIT的Kleppner小组在1998年终于实现了氢原子的BEC [4]. 技术仍是激光冷却与约束，并结合蒸发冷却、磁阱等技术. 达到的氢原子密度为10^{15} cm^{-3}，温度为50 μK，处于凝聚态的原子数为10^8，约10倍于钠原子凝聚体的原子数. 氢原子以其很弱的相互作用，是最早选作进行BEC实验的原子，但真正实现BEC要比碱金属原子晚了几年. 在最终实现氢原子的BEC实验中，所用的探测方法也与以前的办法"将原子从凝聚体中引出来"，并测其速度分布[7]不一样，而是用双光子谱探测. 即氢原子同时吸收两个光子，由1S态跃迁到2S态，实验中加电场时2S态与靠得很近的寿命很短的2D态混合，原子由2P态衰变并辐射出 Lyman α 线，通过对L_α光子的计数检测出经由双光子吸收跃迁到2S态氢原子数. 图1-3 为计数率对激光失谐的双光子谱. 按实验的安排氢原子吸收双光子可分为两种情形. (1) 吸收两个反向运动的光子，原子获得的净动量为零，没有光子的反弹移位或Doppler加宽，如图中那个靠近原点"0"的尖峰. (2) 吸收同向运动的两个光子，双光子的动量及反弹能均被原子所接收，使原子产生约6.7MHz

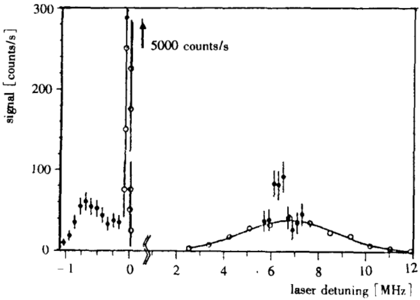


图1-3 捕陷氢原子的双光子谱[4]

图中空心圆圈代表无凝聚样品的谱；实心圆圈为有凝聚特征的谱. 原点附近的尖峰来源于吸收两个反向运动的光子，没有光子反弹移位和Doppler加宽. 右边的宽低峰来源于吸收同向运动的两个光子；实线是正常气体在 $T = 40\ \mu K$时有反弹移位、Doppler加宽的高斯线型. 右侧较窄的Doppler加宽谱（实心圆圈）代表凝聚体的窄的动量分布，而左侧无Doppler移位的峰表示高密度原子引起的能级移位. 图中零失谐坐标是相对无微扰原子的无Doppler激发，所有频率都是相对243nm的激发辐射.

的移位并有Doppler加宽轮廓. 在图中原点“0”的右边，这加宽体现了未凝聚原子气体的温度. 图中的原点“0”是双光子激光频率 $2\omega_L$ 等于1S-2S跃迁频率处(对应的跃迁波长为243nm). 对于第(1)种情形，原子吸收了两个反向运动的光子，没有反弹能引起的移位及Doppler加宽，计数峰值应严格与原点“0”重合，但

实际上还是向左移位了18kHz，这是由邻近的高密度原子(达10^{14} cm^{-3})引起的氢原子能级移位，移位正比于原子密度．我们还注意到在零点左边约400～500 kHz 处的计数峰值，也是高密度原子引起的能级移位，对应的原子密度约为气体原子密度的20多倍，而这就是高密度原子凝聚体的明证．我们还注意到在右侧的Doppler加宽谱峰值附近也发现高密度原子凝聚体．当然重要的是原点左边的约400～500 kHz 处的峰，真正代表了无Doppler移位的双光子吸收谱，这是一个线宽接近于自然线宽的超冷原子源．

1.4 BEC 研究的理论模型[25]

研究玻色凝聚原子体系行为的自然出发点为 Gross-Pitaevskii 理论形式的弱相互作用玻色子理论；这种平均场方法提供了描述 BEC 及有关现象更接近和较简单的方程，这个理论适于描写稀薄气体中二体相互作用的大多数效应．文献[26]用数值计算方法讨论了 1 维和 3 维谐振子势下基态波函数的时间演化，特别是当势阱随时间变化或受扰动的情况．该研究还模拟了形成 BEC 的原子在自由空间膨胀时或势阱受到外部扰动时波函数的动力学演化．

有许多文章研究了吸引型原子体系的 BEC 问题，一般认为具有负散射长度的锂原子均匀体系不能形成稳定的 BEC 态[27]，这是因为它的 s 波散射长度 $\overline{a}$ 是负的，原子间的吸引相互作用将引起凝聚体的崩塌．然而，文献[26,28,29] 预期在充分少的原子数或非常弱的相互作用条件下凝聚体应是稳定的，当这些条件不满足时的衰变和崩塌也有几位作者讨论[29,30]．

弱相互作用的稀薄气体的 BEC 的理论描述已有很长的历

史，并能解释大多数实验结果[13]. 相比之下，BEC 形成的动力学的完全描述还没有建立起来. 对于凝聚形成所需要时间的长短，早期的预计是无限长的[31]，这是根据玻尔兹曼方程，凝聚不可能从零生长. 这样，一个分离的成核过程一定在成核之前[32]和成核之后[33]引入到描述动力学的玻尔兹曼方程. Stoof [34,35] 提出，在短的相干阶段凝聚成核并根据动力学方程生长. Kagan 等人[36,37]讨论了准凝聚体的形成和相位涨落. 最近，玻色气体的全量子力学的动力学理论已提出并用于模型化凝聚的形成过程[38]. BEC 实验上的实现已证实凝聚体是在有限的时间内形成的，同样，两凝聚体之间的高对比度干涉的观察证实凝聚体在有限的时间内演化为长程相干[1]. 凝聚生长速率与平衡时凝聚原子数的关系的实验结果[39]提示出：发生凝聚的两个阶段，快速弛豫产生一个过饱和热云，随后在热云中进行凝聚的慢速生长. 目前的理论结果仅与凝聚第二阶段的实验结果一致.

元激发的研究是量子多体理论的重要任务之一，对于玻色流体，元激发在理解其超流特性时起关键作用. BEC 实现以后，所激发的最低模式的频率的测量和波包传播的观察都已得到. 理论工作的出发点是由含时的 Gross-Pitaevskii 方程导出的耦合方程[40]可用于计算激发的本征频率，它的引入是用于研究均匀玻色气体中的涡旋线激发. 这种方法与在 Bogoliubov 近似下哈密顿的对角化是等价的，文献[41]在均匀玻色气体中准粒子振幅为平面波的条件下求得了声子色散关系. 在简谐势阱条件下，文献[42]计算了捕陷气体的激发. 在捕陷气体所展示的各种激发中，偶极模式特别引人注意，这种振动模式相应于系统质心的运动. 文献[43]在 Bogoliubov 理论框架下详细讨论了这种偶极激发的特性.

要进行 BEC 光学性质的研究，必须建立 BEC 与光相互作用的理论. 原子 BEC 是特殊状态下的原子系统，其与光相互作用必然有不同于普通原子系统的特点. 文献[44]研究了无限空间中均匀的 BEC 对光的散射，结论是，BEC 强烈地反射近共振光，因此在激发谱中共振频率处会出现一个禁带. 对于外势场中的 BEC，并考虑原子间的相互作用，文献[45,46]讨论了强的脉冲激光的散射，并提出可利用这种散射光作为探测 BEC 的一种方法. 而文献[47,48]讨论了弱的连续光的散射，指出其散射谱是一个宽的非罗仑兹线型的背景，加上共振频率处的一个窄峰. 这一系列工作都显示出高于临界温度和低于临界温度使光的散射有很大的不同. 这也逐步建立了较完整的 BEC 与光相互作用的理论[46,48,49].

紧束缚的 BEC 对光的散射的研究[50]，表明这时 BEC 比通常相互独立的原子散射要少；而当 BEC 足够大时，散射增加，并主要沿前向散射. 文献[51,52]研究了非共振光的散射，他们的计算显示了 BEC 的散射谱具有双峰的特性. 对 BEC 的其他光学性质，如自发辐射性质[53,54]，荧光性质[56]，非线性光学响应[56]近几年也都得到了一些理论结果. 关于 EBC 的原子光学和非线性原子光学方面的研究也取得了令人触目的进展. 文献[57]报道了根据双光子 Raman 散射技术(一级 Bragg 衍射)产生的高度准直的准连续原子激光. Lu Deng [58]报道了物质波的多波混频实验，为非线性原子光学的研究打下了基础.

1.5 BEC 的应用前景及研究意义[13]

BEC 的实现，提供了在体系基态上宏观布居的样品原子，其物质波可由单一的宏观波函数来描述. 利用特定的手段从阱

中相干输出的原子的运动行为将服从单模波动方程的描述. 近期最引人注目的成就是“原子激光”的问世[59]，即类似于激光的相干原子束输出. 但是，由于原子具有静质量和原子间的碰撞，会使原子激光的相干性复杂化[60,57]. 原子激光的获得可望有效地提高现有原子钟的准确度：相干原子束的平均速度很低，有利于减小与多普勒效应有关的不准确度. 原子激光的另一个可能的应用领域是纳米技术. 目前，纳米技术是利用扫描隧道显微镜和原子力显微镜来搬移原子和光刻蚀的方法来产生微小的特征量. 由于原子激光可以聚焦并像普通激光一样准直，因此可望利用原子激光通过适当的变换直接形成所需要的花样. 此外，原子激光具有明显的干涉效应，原子本身又具有非零的静质量、有自旋和内能等特点，因此原子激光还可能极大地提高重力加速度和其他一些物理常数的测量精度. 还会有难以预料的用途将给科学技术带来丰富多彩的应用前景.

1.6 本文的安排与我们的工作

第一章简要回顾了 BEC 研究的历史, 介绍了实现 BEC 的相关技术和碱金属原子和氢原子 BEC 的主要实验结果和近几年 BEC 的理论研究工作. 第二章给出无相互作用玻色气体的基本性质，引入振子长度，能量单位和临界温度等. 讨论外加势场对 BEC 的影响，以及体系有限原子数的影响和维数的作用. 第三章研究排斥相互作用对 BEC 的影响，首先根据该 Gross-Pitaevskii 方程得到定态非线性 S 方程，给出解有排斥相互作用情形中性原子玻色－爱因斯坦凝聚的一般方法. 并应用于有排斥相互作用的中性原子体系的解析求解及玻色－爱因斯坦凝聚计算. 第四章给出非线性定态薛定格方程(NLSE)的一种数值求

解方法，并求解简谐势阱中有排斥作用的中性原子体系 NLSE 的基态和激发态解. 讨论非线性定态薛定谔方程的波函数收敛与归一化问题，并对计算精度进行分析. 第五章研究吸引相互作用对 BEC 的影响，首先计算有吸引相互作用的中性原子体系的能级和态函数在一维箱势中的解析解和三维球方势中的数值解，分析原子间的吸引作用对能级和波函数的影响，并与排斥相互作用情形的解进行了比较，讨论吸引相互作用对玻色－爱因斯坦凝聚的影响. 根据简谐势阱中具有吸引相互作用原子体系的非线性定态薛定谔方程(NLSE)的基态解，即凝聚原子数随能量本征值变化的双稳态曲线，研究吸引型 BEC 的亚稳性质和宏观量子隧道. 第六章给出 BEC 的动力学模型，用母函数法求得玻色凝聚体主方程的解，并计算凝聚体形成的增率与粒子数起伏的统计规律. 第七章给出一准确求解 N 原子辐射几率的模型，计算玻色-爱因斯坦凝聚体的自发与受激跃迁几率的增强因子. 第八章给出结论和该领域进一步研究的前景.

第二章　理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚

2.1 均匀玻色气体的 BEC

设有 N 个质量为 m 的无相互作用的玻色子处于体积为 V 的空间（三维箱中的理想玻色气体系统），其哈密顿量为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m} \tag{2-1}$$

其中 $p_i^2=\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{p}_i$，　$\boldsymbol{p}_i$ 为第 i 个粒子的动量算符. 哈密顿量与粒子的位置或坐标无关. 系统的能量本征值是如下单粒子能量（能级）之和

$$\varepsilon_p=p^2/2m \tag{2-2}$$

$p=|\boldsymbol{p}|$，$\boldsymbol{p}$ 是单粒子的动量本征值：$\boldsymbol{p}=(2\pi h/L)\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{n}$ 是大小为 0 和正负整数的矢量，$L=V^{1/3}$.
该系统满足玻色-爱因斯坦分布[27]

$$<n_p>=\frac{ze^{-\varepsilon_p/k_BT}}{1-ze^{-\varepsilon_p/k_BT}} \tag{2-3}$$

其中 $<n_p>$ 表示处于动量为 $\boldsymbol{p}$、能量为 ε_p 的能态的平均粒子数，z 是所谓“易逸度”(fugacity)，$z=e^{\mu/k_BT}$，$<n_p>$ 是

化学势. 总粒子数

$$N = < n_0 > + \sum_{p \neq 0} < n_p > \tag{2-4}$$

当 $V \to \infty$ 时，$\boldsymbol{p}$ 的可能值构成连续谱，对 $\boldsymbol{p}$ 求和可由积分代替，即 $\sum_{p} \to (V/h^3)\int \mathrm{d}^3 p$，但值得注意的是，当 $z \to 1$ 时，(2-4)式中的和式是发散的，因为对应于 ε=0 的那一项趋于无穷. 因此，ε=0 时的这一项可以像整个和一样重要. 考虑到这一点，把这一项单分出来，把其余的求和以积分代替，并利用自由粒子态密度 $D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = (2\pi)^{-2} V(2m/\hbar^2)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon$，有

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V}\frac{z}{1-z} + \frac{2\pi}{h^3}(2m)^{3/2}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon}{z^{-1}\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1} \tag{2-5}$$

积分下限仍取为零，这是因为当 $\varepsilon = 0$ 时 $D(\varepsilon) = 0$，这时对积分无贡献. 第一项中的 $z/(1-z)$ 则代表单粒子态 $\varepsilon = 0$ 上的平均占有数 N_0. 将(2-5) 的积分作变量代换，可进一步写为

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V}\frac{z}{1-z} + \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \tag{2-6}$$

其中 $g_{3/2}(z)$ 为 z 的函数，$g_n(z) = \dfrac{1}{\Gamma(n)}\displaystyle\int_0^\infty \frac{x^{n-1}\,\mathrm{d}x}{z^{-1}\mathrm{e}^x - 1}$，且 $g_{3/2}(z) < g_{3/2}(1) = 2.612\cdots$，$(0 \le z \le 1)$，$\Gamma(n)$ 为伽玛函数；$\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_\mathrm{B}T}$ 称为热波长，与质量为 m、能量为 $k_\mathrm{B}T$ 粒子的德布罗意波长同量级.

当 $N/V > g_{3/2}(1)/\lambda^3$ 时系统中的粒子以宏观上有限的百分比凝聚于 $\varepsilon = 0$ 单粒子态上，此即玻色-爱因斯坦凝聚现

象. 对于给定的粒子密度 $n = N/V$ ，由等式

$$N/V = g_{3/2}(1)/\lambda^3 \tag{2-7}$$

定义一个临界温度 T_c :

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{km}\left(\frac{N}{2.612V}\right)^{2/3} = \beta_0\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{2-8}$$

$\beta_0 = \dfrac{2\pi\hbar^2}{km}2.612^{-2/3}$ ，是一个只跟原子质量有关的常数. 当 $T < T_c$ 时，对应热波长 λ 将足够长，使得 $\lambda^3\dfrac{<n_0>}{V} = \dfrac{\lambda^3 N}{V} - g_{3/2}(z)$，由此看出，形成 BEC 的条件是

$$\lambda > (2.612V/N)^{1/3} \tag{2-9}$$

此式的物理意义是粒子德布罗意波长超过粒子间的距离. 用临界温度 T_c 的语言表达：凝聚区即为 $T < T_c$ 的区域. 在这个温度区域，当 $V \to \infty$ 时， $z = 1$ ，由(2-6) 和(2-8)可得到凝聚数与温度的关系

$$N_0/N = 1 - (T/T_c)^{3/2} \tag{2-10}$$

同样，对于给定的温度 T ，由等式(2-7)也可定义一个临界密度 $n_c = (N/V)_c$:

$$n_c = \left(\frac{N}{V}\right)_c = 2.612\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = \left(\frac{T}{\beta_0}\right)^{3/2} \tag{2-11}$$

确定形成 BEC 的条件用临界参量可表示为

$$\frac{N}{V} < \left(\frac{N}{V}\right)_c = \left(\frac{T}{\beta_0}\right)^{3/2} \tag{2-12}$$

这表明：玻色粒子体系存在一个临界密度，当粒子数密度 $n > n_c$ 时，再增加的粒子将进入基态，这些增加的粒子将不对系统的热力学性质有贡献，此即 BEC 发生[61].

由以上的分析可以看出，可以从两个途径实现 BEC，一种是降低原子气团的温度，使低于给定密度下的临界温度；一种是提高原子气团的密度，使超过给定温度下的临界密度.

2.2 简谐势阱中的 BEC

目前实验中 BEC 的形成是借助某种形式的原子势，对于碱金属原子 BEC 实验中表征其磁阱的重要特点就是束缚势，它可近似为如下二次形式

$$V_{ext} = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \qquad (2\text{-}13)$$

在不考虑原子间相互作用的情况下，这种体系的几乎所有预期结果都是解析的. 多体哈密顿就是如下形式单粒子哈密顿之和

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y + \\ (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z \end{aligned} \qquad (2\text{-}14)$$

式中 $\{n_x, n_y, n_z\}$ 是非零整数. 由势(2-13)束缚的 N 个无相互作用玻色子的基态 $\phi(\boldsymbol{r}_1, \cdots \boldsymbol{r}_N)$ 可通过把所有粒子都放在最低的单粒子态而得到 $(n_x = 0, n_y = 0, n_z = 0)$，即 $\lambda^3 \frac{<n_0>}{V} = \frac{\lambda^3 N}{V} - g_{3/2}(z)$ $\phi(\boldsymbol{r}_1, \cdots \boldsymbol{r}_N) = \prod_i \varphi_0(\boldsymbol{r}_i)$，这里 $\varphi_0(\boldsymbol{r}_i)$ 由下式

给出

$$\varphi_0(\mathrm{r})=\left(\frac{m\omega_T}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2+\omega_y y^2+\omega_z z^2)} \tag{2-15}$$

这里引入了谐振频率的几何平均

$$\omega_T=(\omega_x\omega_y\omega_z)^{\frac{1}{3}} \tag{2-16}$$

这样，密度分布函数可写为 $n(\boldsymbol{r}) = N|\varphi_0(\boldsymbol{r})|^2$，它的值随 N 值而增加. 但原子云的大小与 N 无关. 定义如下的谐振子长度

$$\alpha_T=\left(\frac{\hbar}{m\omega_T}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2-17}$$

它相应于(2-15)式的平均高斯宽度，通常用它表征系统的空间尺度. 在有限温度，仅原子的一部分占据最低能态，其余为在更高能量的激发态上的热分布. 热云的半径比 α_T 大. 假定 $k_{\mathrm{B}}T>>\hbar\omega_T$ 和具有经典的麦克斯韦-玻耳兹曼分布 $n_{\mathrm{cl}}(r)\propto\exp[-V_{\mathrm{ext}}(r)/k_{\mathrm{B}}T]$ 的热原子云密度近似条件下可以大致估计其大小. 如果 $V_{\mathrm{ext}}(r)=(1/2)m\omega_T^2r^2$，高斯宽度是 $R_T=\alpha_T(k_{\mathrm{B}}T/\hbar\omega_T)^{1/2}$，因此，$R_T$ 比 α_T 大得多. 使用玻色分布函数对这个估计没有明显的改变. V.Bagnato 等人[62]详尽地讨论了普遍幂函数势的情况，例如 $U(r)=\varepsilon_1(r/a)^2$ 势场中的临界温度、BEC 基态布居比例为

$$T_{\mathrm{c}}=\left[\frac{h^3N}{1.202\pi^3k^3(2m)^{\frac{3}{2}}}\right]^{\frac{1}{3}}\left[\frac{\varepsilon_1}{a^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{2-18}$$

$$N_0 / N = 1 - \left[\frac{T}{T_c}\right]^3, \quad (T < T_c) \qquad (2\text{-}19)$$

上面的讨论揭示出简谐势阱中的 BEC 在密度分布的中心区会有尖锐的峰出现．图 2-1 给出球对称简谐势阱中 5000 个无相互作用原子在温度 $T=0.9T_c$ 凝聚和热原子密度分布曲线，它相应于柱密度，即沿一个方向积分之后的密度，$n(z)=\int \mathrm{d}\,x n(x,0,z)$，这是典型的测量量，$x$ 方向为用于原子云成象光束的方向．若直接画凝聚密度和非凝聚密度之比，则在中心的值会更大．

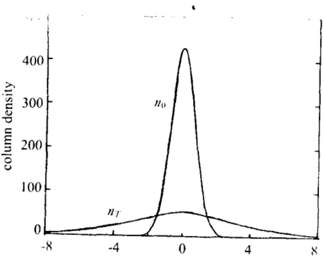


图 2-1 球对称简谐势阱中 5000 个无相互作用原子在温度 $T=0.9T_c$ 凝聚和热原子密度分布曲线．中心的凝聚峰迭加在宽的热原子分布上．距离和密度分别以 a_T 和 a_T^{-2} 为单位，密度归一化为原子数（取自文献[63]）．

通过基态波函数的傅里叶变换，可以计算凝聚体中的原子的动量分布，对于理想气体为高斯型，中心在零动量，

宽度比例于 a_T^{-1}. 热云的分布在动量空间中更宽. 应用经典分布函数可求得这个宽度比例于 $(k_B T)^{1/2}$. 实际上简谐势中的理想气体的凝聚和非凝聚粒子的动量分布有与图 2-1 密度分布 n_0 和 n_T 完全相同的形式.

凝聚体在坐标空间和动量空间都有一个窄峰出现这一特征是很独特的，这对阱中玻色气体凝聚的实验和理论分析都有重要价值. 这不同于粒子凝聚进入零动量状态的均匀气体情况，BEC 不可能在坐标空间中显示出来，因为凝聚的和非凝聚的粒子都充满了相同的体积.

2.3 简谐势阱中玻色气体在有限温度的 BEC

在巨正则系综有限温度 T 粒子总数可由下面的求和得到

$$N = \sum_{n_x,n_y,n_z} \{\exp[(\varepsilon_{n_x n_y n_z} - \mu)/k_B T] - 1\}^{-1} \tag{2-20}$$

而总能量为

$$E = \sum_{n_x,n_y,n_z} \varepsilon_{n_x n_y n_z} \{\exp[(\varepsilon_{n_x n_y n_z} - \mu)/k_B T] - 1\}^{-1} \tag{2-21}$$

其中 μ 是化学势. 在某给定温度以下最低能态的密度变成宏观的，这就相应于 BEC 的开始. 临界温度、基态布居比例和其他热力学量的计算都可以在适当的能谱 $\varepsilon_{n_x n_y n_z}$ 根据(2-18)和(2-19)式而得到.

$$\mu \to \mu_c = \frac{3}{2}\hbar\overline{\omega} \tag{2-22}$$

式中 $\overline{\omega} = (\omega_x + \omega_y + \omega_z)/3$ 是势阱频率的算术平均. 将它们代入求和式，可写为

$$N - N_0 = \sum_{n_x, n_y, n_z \neq 0} \frac{1}{\exp[\hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)/k_B T] - 1} \tag{2-23}$$

为了计算这个和式的解析表达式，通常假定当 $N \to \infty$ 时能级间隔变得越来越小以至于求和可用积分代替

$$N - N_0 = \int_0^{\infty} \frac{dn_x \, dn_y \, dn_z}{\exp[\hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)/k_B T] - 1} \tag{2-24}$$

这个假定相应于激发态的半经典描写. 计算的有效性决定于对于对(2-23)式求和有贡献的激发态能级是否远大于由振子频率所决定的能级间隔. 如果阱中的原子数很大和 $k_B T >> \hbar\omega_T$ 半经典近似被期望是一个好的近似. 通过比较积分式(2-24)和求和式(2-23)的值来检验.

积分式(2-24)通过变量代换可以容易求得

$$N - N_0 = \zeta(3)\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_T}\right)^3 \tag{2-25}$$

式中 $\zeta(n)$ 是黎曼函数，ω_T 是几何平均(2-16)式. 从这个结果可得到 BEC 的转变温度. 事实上，在转变点使 $N_0 \to 0$，我们得到

$$k_B T_c = \hbar\omega_T \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3} = 0.94\hbar\omega_T N^{1/3} \tag{2-26}$$

将上面的表达式(2-26)代入(2-25)式，可以得到当 $T < T_c$ 时凝聚比例对 T 的依赖关系为

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left[\frac{T}{T_c}\right]^3 \tag{2-27}$$

同样的结果也可以重写(2-24)式通过对能量的积分得到

$$N - N_0 = \int_0^\infty \frac{\rho(\varepsilon)\,\mathrm{d}\,\varepsilon}{\exp(\beta\varepsilon) - 1} \tag{2-28}$$

其中 $\rho(\varepsilon)$ 是态密度．可由能谱(2-13)式求得：$\rho(\varepsilon) = (1/2)(\hbar\omega_{\mathrm{ho}})^{-3}\varepsilon^2$．将这个值代入(2-28)式可再求得结果(2-25)式．由积分 $E = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\varepsilon\,\mathrm{d}\,\varepsilon / [\exp(\beta\varepsilon) - 1]$ 可求得系统总能量(2-21)式的结果为

$$\frac{E}{Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}} = \frac{3\zeta(4)}{\zeta(3)}\left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right)^4 \tag{2-29}$$

从能量出发可以计算比热、熵和其他热力学量．以上这些结果可以和第一节均匀玻色气体的理论结果进行比较．

可通过半经典近似计算的另一个量是热粒子密度 $n_T(\boldsymbol{r})$．$n_T(\boldsymbol{r})$ 与凝聚密度 $n_0(\boldsymbol{r}) = N_0|\varphi_0(\boldsymbol{r})|^2$ 之和给出总的密度 $n(\boldsymbol{r}) = n_0(\boldsymbol{r}) + n_T(\boldsymbol{r})$．在 $T < T_{\mathrm{c}}$ 和热力学极限下，热粒子密度可通过对动量空间的积分求得，$n_T(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\,\boldsymbol{p}(2\pi\hbar)^{-3}[\exp(\beta\varepsilon(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})) - 1]^{-1}$，式中 $\varepsilon(\mathrm{p}\cdot\mathrm{r}) = p^2/2m + V_{\mathrm{ext}}(\mathrm{r})$ 是相空间的半经典能量．结果是

$$n_T(\mathrm{r}) = \lambda_T^{-3} g_{3/2}(\mathrm{e}^{-\beta V_{\mathrm{ext}}(\mathrm{r})}) \tag{2-30}$$

其中 $\lambda_T = [2\pi\hbar^2/(mk_{\mathrm{B}}T)]^{1/2}$ 是热波长．函数 $g_{3/2}(\boldsymbol{r})$ 属如下函数类 $g_\alpha(z) = \sum_{n=1}^\infty z^n / n^\alpha$．通过 $n_T(\boldsymbol{r})$ 的空间积分可再一次求得与(2-27)式一致的结果．用类似的方法我们可求得动量空间的热粒子分布：

$$n_T(\boldsymbol{p}) = (\lambda_T m\omega_{ho})^{-3} g_{3/2}(e^{-\beta p^2/2m}). \tag{2-31}$$

以上的分析指出理想气体存在能量的两个尺度：转变温度 k_BT_c 和平均能级间隔 $\hbar\omega_T$. 从(2-26)式可清楚地看到 k_BT_c 可远大于 $\hbar\omega_T$. 在合适的势阱中，N 值的范围从几千到几百万，转变温度是 $\hbar\omega_T$ 的 20 到 200 倍. 这也意味着半经典近似在感兴趣的温度范围内可得到很好的期望结果. 由阱势给定频率 $\omega_T/(2\pi)$典型的范围是 10 到几百赫兹，因此 $\hbar\omega_T$ 有几个 nK 的量级.

2.4 有限原子数对 BEC 的影响

能进入势阱中的原子数并不真正是宏观的，到目前为止，所进行的实验中最大的凝聚原子数约为10^7. 因此，热力学极限从未严格达到. 第一个影响是热力学函数缺乏突变性. 因此，势阱中这些原子的 BEC 一般来说并不是严格的相变. 然而，实际上当温度降低时可观察到最低能态的宏观占有数有很突然地变化，如图 2-2 所示. 这种相变实际上是相对于 $N\to\infty$期待值的近似，但这种影响很小，对于有限粒子数体系的相变、临界温度等术语仍是相当重要的.

为了求得无相互作用玻色气体的热力学性质，需要知道玻色分布函数中的单粒子能谱. 如在巨正则系综中由求和式（2-23）去求平均原子数，没有必要取 $N\to\infty$ 极限，对于给定的原子数和温度，化学势是原子数和温度的函数，求和式可以数值地进行. 用这种方法得到的凝聚比例 $N_0(T)/N$，比热力学极限预期值(2-27)略小. 图 2-3 给出的即是 10^5 个无相互作用粒子凝聚比例的严格计算. 计算表明[64]有限原

子数的影响仅当 N 小于 10^4 才明显．有限原子数对凝聚函数(2-27)式的修正，在大 N 极限已有解析计算[63-66]，结果是

$$\frac{N_0}{N}=1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^3-\frac{3\overline{\omega}\zeta(2)}{2\omega_T[\zeta(3)]^{3/2}}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 N^{-1/3} \qquad (2\text{-}32)$$

这种影响随 $N^{-1/3}$ 下降，并依赖于简谐频率的算术平均 $\overline{\omega}$ 与几何平均 ω_T 之比 $\dfrac{\overline{\omega}}{\omega_T}$．对于轴对称阱，这个比依赖于参数 $\lambda=\dfrac{\omega_z}{\omega_\perp}$，$\dfrac{\overline{\omega}}{\omega_T}=\dfrac{\lambda+2}{2\lambda^{1/3}}$．

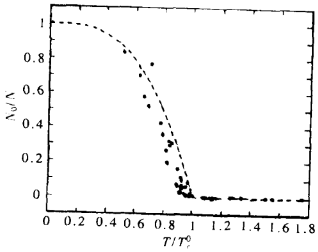


图 2-2 凝聚粒子数比例 N_0/N 随 T/T_c 的变化关系

圆点为文献[20]的实验结果，虚线为(2-27)式的理论曲线．

当 $N=1000$ 时，(2-32)式的期待值已与通过对简谐振子哈密顿的激发态求和所得的严格结果难以区分．在 T_c 附近窄的区域必须考虑高阶修正，才能得到严格结果，如图 2-3 所示，但他们都与热力学极限 $N_0/N=1-(T/T_c)^3$ 略有不同．

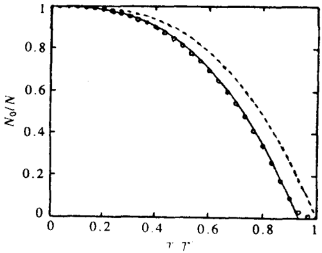


图 2-3 凝聚粒子数比例 N_0/N 随 T/T_c 的变化关系

图中圆圈相应于球对称的简谐势阱中 $N = 1000$ 个原子严格的量子力学计算，实线相应于(2-32)式的预期，虚线为热力学极限(2-27)式的理论值曲线

有限原子数影响会降低凝聚的比例，因此导致转变温度的降低(与 $N \to \infty$ 的极限比较). 使(2-32)式左边为零，可以计算临界温度的相对改变量[63-65]

$$\frac{\delta T_c}{T_c} = \frac{\overline{\omega}\zeta(2)}{2\omega_{ho}[\zeta(3)]^{2/3}} N^{-1/3} \approx -0.73\frac{\overline{\omega}}{\omega_{ho}} N^{-1/3} \qquad (2\text{-}33)$$

2.5 空间维数对 BEC 的影响

到目前为止，所讨论的都是三维空间中理想玻色气体的特性. 尽管在势阱三个方向上的频率可以不同，凝聚体依赖于温度的有关结果是假定了 $k_B T$ 远大于所有的振子能量 $\hbar\omega_x$、$\hbar\omega_y$、$\hbar\omega_z$. 为了观察降低维数带来的影响，我

们应该去掉一个或两个方向.

一维和二维玻色气体的统计行为表现出很独特的性质.在有限温度一维和二维的均匀气体的 BEC 不可能发生[61]，因为热涨落使凝聚体极不稳定. 由于 BEC 状态的理想气体，化学势为零，动量分布，$n(p)\propto[\exp(p^2/2mk_{\rm B}T)-1]^{-1}$，显示出$1/p^2$红外发散，因此，在热力学极限下，在一维和二维情况对积分$\int {\rm d}\,pn(p)$产生发散的贡献. 在有限温度一维和二维的有相互作用的均匀气体的 BEC 也不可能发生[67].当存在简谐势场，由于态密度所展示的不同行为，热涨落的影响被强烈地抑制. 事实上，对于均匀气体态密度$\rho(\varepsilon)$表现为$\varepsilon^{(d-2)/2}$，d是空间维数，在有简谐势时，态密度$\rho(\varepsilon)\propto\varepsilon^{d-1}$，因此积分(2-28)式在 2D 情形也是收敛的. 相应的临界温度由下式给出

$$k_{\rm B}T_{2D}=\hbar\omega_{2D}\left(\frac{N}{\zeta(2)}\right)^{1/2} \tag{2-34}$$

式中$\omega_{2D}=(\omega_x\omega_y)^{1/2}$. 人们首先注意 $2D$ 情况相应于$N\to\infty$和$\omega_{2D}\to 0$，但积$N\omega_{2D}^2$保持为常数的热力学极限.为了在实际 $3D$ 势阱中获得 $2D$ BEC, 应该选择第三方向的频率ω_z足够大使条件$\hbar\omega_{2D}<<k_{\rm B}T_{2D}<\hbar\omega_z$得到满足；这意味着对阱的变形有严格的要求. 简谐势阱中 $2D$ BEC 的主要特性和对非均匀气体的拓展已被详细讨论[68].

在 $1D$ 情况下，即使有简谐势存在也不可能发生 BEC，因为在式(2-28)中的积分是对数发散. 这意味着如果积$N\omega_{1D}$保持为定值，$1D$ 的 BEC 的临界温度将趋于零. 事实上 $1D$ 情况下理想气体的临界温度可被计算[64]

$$k_B T_{1D} = \hbar\omega_{1D} \frac{N}{\ln(2N)} \tag{2-35}$$

式中 $\omega_{1D} = \omega_z$. 尽管在热力学极限下不存在 BEC，然而对有限粒子数系统在合适的温度间隔内，最低单粒子态上显示出大的布居数. 此外，如果 N 的值和势阱参数选择适当，可以观察到与最低能态宏观占据数有关的有趣现象，它发生在两个不同的阶段. 势阱的有关参数同时满足条件 $T_{1D} < T_{3D}$ 和 $\hbar\omega_\perp < k_B T_{3D}$，这里 T_{3D} 与(3.26)式给出的临界温度一致，$\omega_\perp$ 是 xy 平面内势阱的频率. 在 $T_{1D} < T < T_{3D}$ 间隔内，仅径向自由度内凝结，而在轴向自由度内没有凝聚发生. 在 $T < T_{1D}$ 的更低温度轴向也开始凝结，并且基态全面进入宏观方式布居. 两段 BEC 的例子如图 2-4 所示.

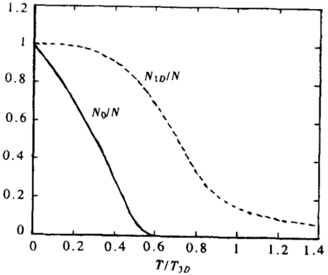


图 2-4　在极不对称阱（$\omega_\perp = 5.6\times10^4\omega_z$）中 $N = 10^6$ 个原子的理想气体的行为

实线：基态（$n_x = 0, n_y = 0, n_z = 0$）上原子的比例

虚线：最低径向态（$n_x = 0, n_y = 0$）上原子比例

对于低维势阱情况的研究[69]表明，如果低维势阱不是“硬壁”的，而是空间渐变的势，则在 2 维情况下，任何幂函数势阱中都可以形成 BEC；而在一维情况下，则只有在幂指数小于 2 的势阱中才有可能形成 BEC.

2.6 非简谐势阱中的 BEC

在实现 BEC 实验中要达到所要求的低温的关键步骤是蒸发冷却. 这个技术的原理是根据阱中热原子的损失而降低温度. 如果人们能够以可逆的方式绝热地冷却系统[70,71]将会打开新的有趣的前景. 通过以一个比内部平衡速率更慢的速率绝热地改变势阱的形状可以获得气体的可逆冷却. 用于研究绝热变化影响的一类囚禁势有如下幂律形式

$$V_{\text{ext}}(\mathrm{r}) = Ar^{\alpha} \tag{2-36}$$

为简单，这里假定是球对称的. 在上式势阱中 BEC 的临界温度已求得[62]

$$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = \left[\frac{N\hbar^{3}}{(2m)^{3/2}}\frac{6\sqrt{\pi}A^{\alpha}}{\Gamma(1+\delta)\zeta(3/2+\delta)}\right]^{1/(3/2+\delta)} \tag{2-37}$$

这里已引入了参数 $\delta = 3/\alpha$，而 $\Gamma(x)$ 是通常的伽玛函数. 通过设 $\delta = 3/2$ 和 $A = m\omega_T^2/2$ 我们可以回到各向同性简谐势阱情形的转变温度. 设 $\delta \to 0$ 得到箱势的结果. 在(2-36)束缚势中无相互作用气体的热力学可以直接计算[62,71]. 例如可求得凝聚比例 $N_0/N = 1-(T/T_{\mathrm{c}})^{3/2+\delta}$. 与可逆过程更密切的就是熵，它在绝热过程中保持不变. 在 T_{c} 以上，系统可近似为经典的麦克斯韦-玻尔兹曼气体，单粒子熵有如下形式

$$\frac{S}{Nk_{\mathrm{B}}}=\left(\frac{5}{2}+\delta-\ln\zeta(3/2+\delta)\right)+\left(\frac{3}{2}+\delta\right)\ln\left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right) \tag{2-38}$$

从这个方程可以看出熵仅通过比 T/T_{c} 依赖于外加势场的参数 A. 这样对于固定的幂律势（δ 给定），A 的绝热变化(例如简谐势阱的绝热膨胀)并不能更接近相变，因为比值 T/T_{c} 保持常数. 但通过绝热地增加 δ 可使比值 T/T_{c} 降低，例如从简谐势 $\delta_1=3/2$ 变到线性势 $\delta_2=3$，可得到初末约化温度 $t=T/T_{\mathrm{c}}$ 之间的关系 $t_2=0.7t_1^{2/3}$. 在这种情况下一个在两倍临界温度（约化温度 $t_1=2$）的系统可被冷却到接近临界点（约化温度 $t_2=1.1$）. 利用这种技术（适当地改变 δ）应能使一个系统从没有凝聚的高温相绝热地冷却到有较大比例的原子在凝聚态的 T_{c} 以下的温度. 应用这种绝热变形实现 BEC 的可能性最近已成功地进行了实验探索[72].

第三章　排斥相互作用对 BEC 的影响

3.1 引 言

在 Bose-Einstein 凝聚实验中，中性原子有磁场势阱作用，原子间有有效的排斥或吸引相互作用，这与原子的 Bose-Einstein 凝聚理论[8]针对自由中性原子，也没有原子与原子间的相互作用，仅仅是自由原子在动量空间的凝聚不一样．将 Bose-Einstein 凝聚理论推广到外势场不为零的情况并不困难，但原子间存在相互作用时，一般来说不易求解．在总粒子数 N 很接近于凝聚体原子数 N_0，即 $N-N_0 \ll N_0$时，有 Bogoliubov 近似处理与微扰法[41,73]．当这条件不满足时，这些近似与微扰法[41]也就不能应用．本章的目的在于探求不受 $N-N_0 \ll N_0$条件限制且 $g>0$ 的中性原子的 Bose-Einstein 凝聚的一般方法[74](下面简称 BEC 一般方法)．为了简化并能解析求解，并应用于势场 $V=0$，但有排斥相互作用 $g>0$ 情形的中性原子体系．求其解析解，并进行玻色－爱因斯坦凝聚的有关计算，分析原子间的相互作用对玻色－爱因斯坦凝聚的影响．

3.2 近理想 Bose 气体的理论描写

通常用近理想气体来描写对理想气体改进的物理气体

模型，它是非常稀薄的粒子系统，粒子间的相互作用是在粒子间的有限范围的作用势，不存在二粒子束缚态. 气体稀薄的意思是能将粒子间的相互作用作为理想气体的微扰. 在非常低的温度下，这种系统有两个重要的长度量纲的参数，热波长λ和平均粒子间距$V^{1/3}$. 这两个参数在大小上是可以比较的，但它们一定要远大于粒子间势场的作用范围. 在量子力学中，一个粒子不可能定域在它的德布罗意波长范围内，这里它可用热波长来代替. 这样一个粒子"展开"在比势作用范围大得多的空间范围上，在任何给定粒子的相互作用范围内找到另一个粒子的几率是很小的. 因此，①尽管粒子之间的势可以有很大的值，粒子所感受到的有效相互作用是很小的；②相互作用势的细节不重要，因为展开在空间中的一个粒子仅感受到势的平均影响. 在量子散射理论中，通过一个势场产生的低能散射不依赖于势场的形状，而依赖于来自势场的单一参数，即散射长度$\overline{a}$，低能散射时总的散射截面为$4\pi\overline{a}^2$. 因此$\overline{a}$可大致地认为是势的有效直径，也可以说对于低能情况来自一个势场的散射看起来像来自一个直径为$\overline{a}$的硬球的散射. 因此，在极低的温度下可借助三个参数λ，$V^{1/3}$和$\overline{a}$来描写这种非理想气体.

这样一种体系的哈密顿量可由一个有效的哈密顿量代替，这个哈密顿仅有散射参数明显地出现. 在硬球势模型下利用赝势方法求得在低能($k \to 0$)球对称(s 波)散射长度$\overline{a}$与s波相移δ_0之间的关系[27]

$$\overline{a} = -\lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_0}{k} \tag{3-1}$$

对于硬球势，散射长度就是硬球直径. 对于慢粒子在球方

势阱的散射求得[75]:

$$\tan \delta_0 \approx kd\left[\frac{\tan Kd}{Kd} - 1\right] \tag{3-2}$$

式中 $K^2 = k^2 + K_0^2$，$K_0^2 = 2mV_0 / \hbar^2$，V_0 是阱深，d 是阱宽. 如将 $k \to 0$ 的波函数表示为硬球势波函数的形式，散射长度与 s 波相移的关系仍是(3-1)式. 散射长度 $\overline{a}$ 与势阱参数 V_0，d 之间的关系可表示为

$$\overline{a} = -d\left[\frac{\tan K_0 d}{K_0 d} - 1\right] \tag{3-3}$$

当势阱深度 $K_0 d > \pi/2$ 时，由(3-2)式知 $\tan\delta_0 < 0$，故 $\overline{a} > 0$，表现为排斥势. 当势阱的深度不够，$K_0 d < \pi/2$ 时，阱内束缚不住 s 态的粒子，$\tan\delta_0 > 0$，故散射长度是负的，表现为吸引势.

近理想 Bose 气体的条件为：$\overline{a}(N/V)^{1/3} \ll 1$. 仅考虑二体作用的玻色粒子系统的哈密顿量为

$$H = \sum \frac{p^2}{2m}\hat{a}_p^+\hat{a}_p + \frac{1}{2}\sum \langle p'_1 p'_2 | U | p_1 p_2 \rangle \hat{a}_{p'_1}^+\hat{a}_{p'_2}^+\hat{a}_{p_2}\hat{a}_{p_1} \tag{3-4}$$

求和是对下标出现的所有动量. 粒子的产生和湮灭算符服从对易规则 $\hat{a}_p\hat{a}_p^+ - \hat{a}_p^+\hat{a}_p = 1$. 假定粒子动量很小，即 $p\overline{a}/\hbar \ll 1$，以及激发态上的粒子数相对基态上的粒子数很小，即 $\hat{a}_0^+\hat{a}_0 = N_0 \approx N$，可求得哈密顿量的表达式为[85]

$$H = \frac{N^2U_0}{2V} + \sum_p \frac{p^2}{2m}\hat{a}_p^+\hat{a}_p + \frac{NU_0}{2V}\sum_{p\neq 0}(\hat{a}_p\hat{a}_{-p} + \hat{a}_p^+\hat{a}_{-p}^+ + 2\hat{a}_p^+\hat{a}_p) \tag{3-5}$$

根据微扰理论二级近似公式和散射振幅的玻恩近似公式可求得

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2\overline{a}}{m}(1 + \frac{4\pi\hbar^2\overline{a}}{V}\sum_{p\neq 0}\frac{1}{p^2}) \tag{3-6}$$

通过算符的线性变换使哈密顿量对角化，从而求得能级. 对于基态能量有

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2\overline{a}N}{mV}[1 + \frac{128}{15}\sqrt{\frac{\overline{a}^3 N}{\pi V}}] \tag{3-7}$$

在 $T = 0$ 时，气体的化学势为

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial V} = \frac{4\pi\hbar^2\overline{a}N}{mV}[1 + \frac{32}{3}\sqrt{\frac{\overline{a}^3 N}{\pi V}}] \tag{3-8}$$

由(3-7)和(3-8)式可以看出，为使 E_0 和 μ 为实数，则要求散射长度 $\overline{a} > 0$. 这表明上述公式仅适用于散射长度 $\overline{a} > 0$ 的空间均匀的 Bose 气体原子体系.

为研究相互作用对 BEC 的影响，许多文献研究了这种均匀近理想气体的转变温度相对于理想气体转变温度 T_0（(2.8)式）的变化 $\Delta T/T_0 = (T_c - T_0)/T_0$，得到非常不同的结果. 较早的论证[27]是 $\Delta T > 0$，因为空间的排斥导致动量空间的吸引，这会使这种非理想气体更容易凝聚. Toyoda [76] 得到的结果是

$$(\Delta T/T_0)_{\text{Toyoda}} = -\frac{8\sqrt{2\pi}}{3[\zeta(3/2)]^{2/3}}(n\overline{a}^3)^{1/6} \tag{3-9}$$

即 $\Delta T < 0$. Gruter [77] 根据 Monte Carlo 模拟的数值计算得到

$$(\Delta T / T_0)_{\text{Gruter}} = 0.34(n\bar{a}^3)^{0.34} \tag{3-10}$$

最近, Holtmann [78] 在某平均场假定下给出

$$(\Delta T / T_0)_{\text{Holtmann}} = 0.7(n\bar{a}^3)^{1/3} \tag{3-11}$$

K. Huang [79] 应用状态方程的维里展开求得

$$(\Delta T / T_0)_{\text{Huang}} = \frac{8\sqrt{2\pi}}{3[\zeta(3/2)]^{2/3}}(n\bar{a}^3)^{1/6} \tag{3-12}$$

这一结果与 Toyoda 的结果(3-9)式数值相同，都正比例于 $\sqrt{\bar{a}}$，但符号相反. 而式(9-10),(9-11)的结果的数值虽然不同，但都近似为 $\Delta T \sim \bar{a}$.

对于束缚的非均匀近理想气体的转变温度移动 ΔT，文献[80]求得的结果是

$$\Delta T / T_0 = -1.3 \frac{\bar{a}}{\alpha_T} N^{1/6} \tag{3-13}$$

有限原子数对转变温度的影响(2.32)式也产生负的移动，临界温度的测量[20]似乎表明有负移动的出现，但目前实验的精度还不能得出确定的结论.

3.3 Bogoliubov 近似微扰法与 BEC 一般方法

为了讨论方便，我们参照文献[41]，给出基于 Bogoliubov 近似的微扰法概要. 多粒子体系的 Hamiltonian 为

$$H = \int d^3 r \hat{\Psi}^+ \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}\right)\hat{\Psi} + \frac{1}{2} g \int d^3 r \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \hat{\Psi} \tag{3-14}$$

式中 Ψ，Ψ^+ 为 Boson 场算子，并满足 Boson 场算子对易规则. 现考虑温度已低于转变温度的凝聚相，绝大多数原子为凝聚体，只有少数为非凝聚体. 很自然将 $\hat{\Psi}$ 表示为凝聚

体 $\Psi(r)$ (C 数)与非凝聚体 $\hat{\phi}$ (算子)的迭加(Bogoliubov 近似)

$$\hat{\Psi} = \Psi(r) + \hat{\phi}(r) \tag{3-15}$$

(3-15)式成立的条件为 $N - N_0 << N_0$. $\Psi(r)$, $\hat{\phi}$ 可表示为

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= V^{-1/2}\, \mathrm{e}^{iS(r)}\, f(r) \\ \hat{\phi}(r) &= \mathrm{e}^{iS(r)} \sum_j [u_j(r)\alpha_j - v_j^*(r)\alpha_j^+] \end{aligned} \tag{3-16}$$

(3-16)式即 Bogoliubov 变换; α_j、α_j^+ 为准粒子 Boson 算子，并满足 Boson 算子对易关系，求和号 $\sum_j$ 不包括凝聚体.

$\Psi(r)$ 满足非线性 Schrödinger 方程即 Gross-Pitaevskii 方程

$$[-(2m)^{-1}\hbar^2\nabla^2 - \mu + g|\Psi|^2]\Psi = 0 \tag{3-17}$$

当求得凝聚体的解 $\Psi(r)$ 后，就可解非凝聚体(激发态)的 $u_j(r)$, $v_j(r)$ 的耦合方程

$$\begin{aligned} Lu_j - g\,|\,\Psi\,|^2\, v_j &= E_j u_j \\ L^* v_j - g\,|\,\Psi\,|^2\, u_j &= -E_j v_j \end{aligned} \tag{3-18}$$

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla + i\nabla S(r)]^2 - \mu + 2g\,|\,\Psi\,|^2$$

一般说来方程(3-18)有正能解 $u_j(r)$, $v_j(r)$, E_j 与负能解 $u_j^*(r)$, $v_j^*(r)$, $-E_j$, 在求统计平均时，只取正能解. $u_j(r)$, $v_j(r)$ 满足如下的正交关系

$$\int \mathrm{d}^3 r[u_j u_k^* - v_j v_k^*] = \delta_{jk} \tag{3-19}$$

按下式求粒子密度的统计平均

$$\begin{aligned} &< \alpha_j^+ \alpha_k > = < \alpha_k \alpha_j^+ > - \delta_{jk} = \delta_{jk} f_j \\ &f_j = [e^{\beta E_j} - 1]^{-1} \end{aligned} , \qquad (3\text{-}20)$$

而不是先求配分函数 ζ，再计算粒子数 $N = -\frac{\partial \quad \zeta}{\partial \quad \alpha}$ [81].

由上所述，微扰法就是在假定已有 N_0 个原子已处于BEC状态前提下通过Bogoliubov近似与变换得出的计算非凝聚体粒子统计分布 $n_e = n_e(T) \quad (<< N_0)$ 的方法．而我们这里要给出的一般方法是包括凝聚体与非凝聚体在一起求统计平均．先求出系统的完备的态函数及能量本征值 Ψ_j, E_j，然后按一般的统计力学方法[81]计算配分函数 ζ，再求粒子数 $N = -\frac{\partial \zeta}{\partial \alpha}$．并判明处于基态的原子数 N_0 是否已发生BEC．这种理论模式与无相互作用自由原子的动量空间的BEC[8,81]基本相同，差别只在 $g > 0$ 情形 Ψ_j, E_j 的确定与在 $g = 0$ 情形不同．$g = 0$ 情形，我们只需解线性薛定谔方程，而 $g > 0$ 情形，则需要解非线性薛定谔方程(NLSE)．对于 $V \neq 0$ 情形可数值求解，对于 $V = 0$ 情形可求解析解，此即下节所要讨论的．

3.4 有排斥相互作用的中性原子的态函数

首先参照(3-14)式，将包括势阱 V 与原子相互作用的Hamiltonian写为

$$\int \Psi^* H \Psi \, d^3 r = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V + \frac{1}{2} g \Psi^* \Psi\right) \Psi \, d^3 r \qquad (3\text{-}21)$$

式中 Ψ^*, Ψ 为原子的波函数而不是算子，对(3-21)式进行变

分[82]

$$\delta\int \Psi^* H\Psi \, \mathrm{d}^3 r = 0 \tag{3-22}$$

并满足归一化条件

$$\int \Psi^* \Psi \, \mathrm{d}^3 r = 1 \tag{3-23}$$

应用未知乘子法，便得出原子所满足的定态(包括基态和激发态)非线性薛定谔方程

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g|\Psi|^2)\Psi = E\Psi \tag{3-24}$$

这方程形状就是 Gross-Pitaevskii 方程(3-17)，但含义不一样. 方程(3-17)是用来描写基态即凝聚态的原子，$g = N_0 u$ (N_0 为凝聚态的原子数，$u = \frac{4\pi\hbar^2\bar{a}}{m}$，$\bar{a}$ 为散射长度). 而方程(3-24)中的 $g = Nu$，N 包括基态与激发态在内总的原子数，不论凝聚与否. 同样 Ψ 也不只是描写基态，也包括激发态在内. 式(3-24)帮助我们定出中性原子系统的本征态 Ψ_j 及相应的本征值 E_j，而这些正是我们计算配分函数 ζ，并按 $N = -\frac{\partial\zeta}{\partial\alpha}$ 计算原子数所需要的. 至于是否发生玻色-爱因斯坦凝聚取决于总的粒子数 N 及温度 T. 这些 Ψ_j 是归一化的. 方程(3-24)是非线性的，当 $g \to 0$ 时，这些 Ψ_j 趋近于完备正交系列 $\tilde{\Psi}_j$. 为简单起见，我们先讨论一维运动的自由原子，这时方程(3-24)可写为

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + g|\Psi|^2)\Psi = E\Psi \tag{3-25}$$

当 $g \to 0$ 时，方程(3-25)可写为

$$(\frac{d^2}{dx^2} + k_n^2)\widetilde{\Psi}_n = 0 \tag{3-26}$$

方程 (3-26) 满足边界条件“当 $x=0, a, \widetilde{\Psi}=0$”的完备正交系列为

$$\begin{aligned} \widetilde{\Psi}_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_n x, k_n = \frac{n\pi}{a} \\ \widetilde{E}_n &= \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} \end{aligned} \tag{3-27}$$

加上排斥势后，令 $\Psi = \widetilde{N}^{1/2} a^{-1} \Psi_n$，$\widetilde{N}$ 的量纲为 a^{-1}，Ψ_n 为无量纲的，方程(3-25)可写为

$$(\frac{d^2}{dx^2} + (k_n^2 + 2k_g^2) - 2k_g^2 \Psi_n^2)\Psi_n = 0 \tag{3-28}$$

式中 $k_g^2 = \frac{mg}{\hbar^2 a^3}\widetilde{N}a = k_{g_0}^2 \widetilde{N}a$，$\widetilde{N}\int_0^a \Psi_n^2 \, dx = 1$，$\widetilde{N}$ 为归一化常数. 换变数并引入新参量，将(3-28)式写为

$$(\frac{d^2}{d\xi^2} + (1+\lambda^2) - 2\lambda^2 \Psi_n^2)\Psi_n = 0 \tag{3-29}$$

式中 $\lambda^2 = \frac{k_g^2}{k_g^2 + k_n^2}$，$\xi = \sqrt{k_g^2 + k_n^2}\, x$

(3-29)式的积分为

$$\left(\frac{d\Psi_n}{d\xi}\right)^2 = 1 - (1+\lambda^2)\Psi_n^2 + \lambda^2 \Psi_n^4 \tag{3-30}$$

$$\xi = \int_0^{\Psi_n} \frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\sqrt{(1-\Psi_n^2)(1-\lambda^2\Psi_n^2)}}$$

这是第一类椭圆积分，可用 Jacobi 椭圆函数来表示[83]

$$\Psi_n = sn(\xi, \lambda^2)$$

$$sn(\xi + 4mK + 4m'\mathrm{i}K, \lambda^2) = sn(\xi, \lambda^2)$$

$$K(\lambda^2) = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\sqrt{(1-\Psi_n^2)(1-\lambda^2\Psi_n^2)}} = \int_0^{\pi/2} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1-\lambda^2\sin^2\varphi}}$$

$$K(\lambda^2) = K(1-\lambda^2)$$

(3-31)

式中 m、m'为整数．又令 $q = \mathrm{e}^{-\pi K/K}$，则 $sn(\xi, \lambda^2)$ 可写为

$$sn(\xi, \lambda^2) = \frac{2\pi}{\lambda K}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{q^{j+\frac{1}{2}}}{1-q^{2j+1}}\sin\frac{(2j+1)\pi\xi}{2K} \qquad (3\text{-}32)$$

现计算各参量间的关系，并求本征值，定义

$$n_g = \frac{k_{g0}a}{\pi} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{mg}{\hbar^2 a}} = \sqrt{\frac{4N\bar{a}}{\pi a}} \qquad (3\text{-}33)$$

式中 N 为总原子数，由(3-28)，(3-29)式中参数的定义得

$$\frac{k_g^2 a^2}{\pi^2} = \frac{mg}{\pi^2\hbar^2 a}\widetilde{N}a = \left(\frac{k_{g0}a}{\pi}\right)^2\widetilde{N}a = n_g^2\widetilde{N}a \qquad (3\text{-}34)$$

为求得 $\widetilde{N}a$ 与 λ 的函数关系，还是由定义(3-28)式出发，

并应用(3-31)式得

$$\widetilde{N}a=\frac{\sqrt{k_n^2+k_g^2}\,a}{\int_0^{\sqrt{k_n^2+k_g^2}\,a} sn^2(\xi,\lambda^2)\,\mathrm{d}\xi} \tag{3-35}$$

根据 $x=0,\ a,\Psi=0$ 的边界条件，故 $\sqrt{k_n^2+k_g^2}\,a=2nK$ ，则上式为

$$\widetilde{N}a=\frac{2nK}{\int_0^{2nK} sn^2(\xi,\lambda^2)\,\mathrm{d}\xi}=\frac{2K}{\int_0^{2K} sn^2(\xi,\lambda^2)\,\mathrm{d}\xi} \tag{3-36}$$

由边界条件 $\sqrt{k_n^2+k_g^2}\,a=\frac{k_g a}{\lambda}=2nK$ 及(3-34)式 $\frac{k_g a}{\pi}=n_g\sqrt{\widetilde{N}a}$ 得

$$\frac{n_g}{n}=\frac{2K\lambda}{\sqrt{\widetilde{N}a}\,\pi} \tag{3-37}$$

由(3-29), (3-34)式

$$k_n=\frac{\sqrt{1-\lambda^2}}{\lambda}k_g,\ k_g=k_{g_0}\sqrt{\widetilde{N}a} \tag{3-38}$$

(3-36)式给出 $\widetilde{N}a$ 与λ的函数关系 $\widetilde{N}a=\widetilde{N}a(\lambda)$. 代人(3-32)式右端，当左端 n_g,n 给定后，由(3-37)式便能定出λ的本征值 λ_n，并可计算出 k_g 及本征值 k_n 以及能量本征值

$$E_n=\frac{(\hbar k_n)^2}{2m}+\frac{2(\hbar k_g)^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2nK(\lambda_n^2)}{a}\right)^2(1+\lambda_n^2)=\widetilde{E}_n\varepsilon_n$$

$$\varepsilon_n=\left(\frac{2K(\lambda_n^2)}{\pi}\right)^2(1+\lambda_n^2) \tag{3-39}$$

图 3-1 给出当 n_g 给定后，本征值 λ_n 随 n 的变化曲线. 由这曲线可读出本征值 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \cdots$. 图 3-2、图 3-3 分别给出 ε_n, E_n 随 n 的变化.

当 λ 很小时，$K \to \frac{\pi}{2}$，由(3-37), (3-38)及(3-33)式给出

$$
\begin{aligned}
n_g &= \frac{\lambda}{\sqrt{\tilde{N}a}} n \\
k_n &\approx \frac{k_{g_0}}{\lambda}\sqrt{\tilde{N}a} = \left(\frac{\pi}{a}\frac{\lambda}{\sqrt{\tilde{N}a}} n\right)\frac{\sqrt{\tilde{N}a}}{\lambda} = \frac{n\pi}{a}
\end{aligned}
\tag{3-40}
$$

式(3-40)验证了当 $\lambda \to 0$ 即 $g \to 0$ 时，k_n 趋于(3-27)式的 $k_n = \frac{n\pi}{a}$. 这时 E_n 趋于(3-27)式的无相互作用自由原子的能量本征值 $\tilde{E}_n$.

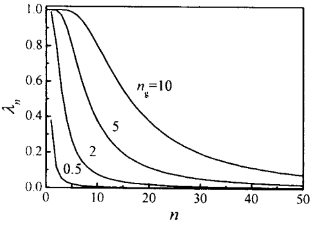


图 3-1 表示本征值为 λ_n 随 n 的变化曲线.

n_g = 0.5,2,5,10 已在曲线上标出

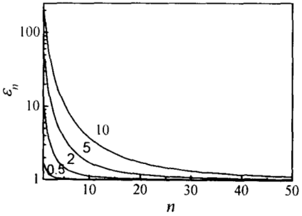


图 3-2　表示本征值为 ε_n 随 n 的变化曲线，
$n_g = 0.5,2,5,10$ 已在曲线上标出

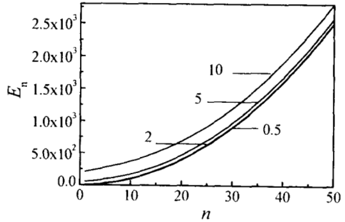


图 3-3　表示本征值为 E_n 随 n 的变化曲线，
$n_g = 0.5,2,5,10$ 已在曲线上标出.

3.5 中性 Bose 原子的 BEC 计算

参照文献[81] Bose 气体的基本公式即配分函数ζ、粒子数N及能量E分别为

$$\zeta = -\sum \omega_l \ln(1-\mathrm{e}^{-\alpha-\beta E_l})$$
$$N = -\frac{\partial\zeta}{\partial\ \alpha}, E = -\frac{\partial\zeta}{\partial\ \beta} \tag{3-41}$$

将此公式应用于方盒($x=0,a;y=0,a;z=0,a$)中的无相互作用自由原子气体[81]，便得

$$\zeta = -\omega_0 \sum_{p,q,r} \ln(1-\mathrm{e}^{-\alpha-\beta(\widetilde{E}_p+\widetilde{E}_q+\widetilde{E}_r)}) \tag{3-42}$$

式中 $\widetilde{E}_{p,q,r} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\ \pi}{a}\right)^2 p^2, q^2, r^2$ 正是(3-27)式给出的无排斥相互作用的自由原子的能量本征值. 当原子间存在排斥相互作用时，原子的能量本征值应由E_p, E_q, E_r替代. $E_p,\cdots$,等由(3-39)式给出，即 $E_p = \widetilde{E}_p\varepsilon_p,\cdots$; 而相应的$\lambda_p,\lambda_q,\lambda_r$等由(3-37)式给出. 这时(3-42)式应改写为

$$\zeta = -\omega_0 \sum_{p,q,r=1} \ln(1-\mathrm{e}^{-\alpha-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r)}), \sigma = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2KT} \tag{3-43}$$

在作凝聚计算时，十分重要的是将(3-43)式中的基态$p=q=r=1$分离开，即将ζ表示为

$$\zeta = -\omega_0 \ln(1-\mathrm{e}^{-\alpha-3\sigma\varepsilon_1}) - \omega_0 \sum_{p,q,r=1} \ln(1-\mathrm{e}^{-\alpha-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r)}) \tag{3-44}$$

和式 $\sum'$ 中不包括 $p=q=r=1$ 的项. 令 $z=\mathrm{e}^{-\alpha-3\sigma\varepsilon_1}$, 则

$$N=-\frac{\partial\zeta}{\partial\alpha}=\frac{\omega_0 z}{1-z}+\omega_0\sum_{p,q,r=1}'\frac{z\mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}{1-z\mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}=N_1+N_2 \tag{3-45}$$

式中 N_1,N_2 分别为基态和激发态的原子数. 若用化学势 μ 表示[81], 则 $\alpha=-\beta\mu$, $\mu<3E_1$, $z=\mathrm{e}^{\beta(\mu-3E_1)}<1$.

参照本征值曲线图 3-3 及(3-45)式 $N_1=\dfrac{\omega_0 z}{1-z}$, $N_2=\omega_0\sum_{p,q,r=1}'\dfrac{z\mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}{1-z\mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}$ (计算时, 将 ω_0 取为 1), 可算出当 σ=0.1时, N_1,N_2 随 z 的变化曲线为图 3-4.

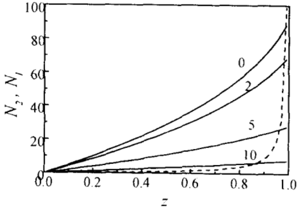


图 3-4 $\sigma=0.05$ 时, 激发态原子数 N_2(实线, $n_g=0,2,5,10$ 已在曲线上标出)和基态原子数 N_1(虚线)随 z 的变化曲线

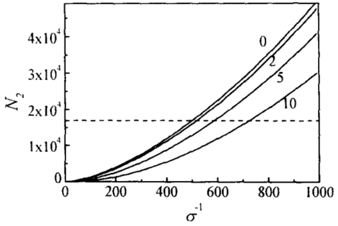


图 3-5　$z=1$时，激发态原子数 N_2 随 σ^{-1}的变化曲线，$n_g=0,2,5,10$ 已在曲线上标出.

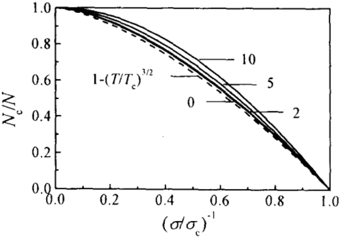


图 3-6　$z=1$时，凝聚原子数与总原子数之比 N_c/N 随$(\sigma/\sigma_c)^{-1}$的变化曲线
实线为$n_g=0,2,5,10$ 的曲线，虚线为$1-(T/T_c)^{3/2}=1-(\sigma_c/\sigma)^{3/2}$ 曲线.

当 z 小时，N_1 变化缓慢，但当 $z \to 1$，N_1 急剧上升，远远超过 N_2，这就是发生凝聚的情形．为求得系统发生 BEC 的临界温度 T_c 以及 g 对 T_c 的影响，我们计算了当 $z \to 1$ 时 N_2 随 σ^{-1} 的变化曲线，即图 3-5．从图中看出，当温度 $(T \propto \sigma^{-1})$ 给定，由于排斥相互作用 $g > 0$,使得激发态能容纳的原子数 N_2 比 $g = 0$ 情形减少了．现取定总粒子数 $N = 16963$ 时，即图 3-5 中虚线所示，与这些曲线的交点定出凝聚的临界温度，用 σ_c^{-1} 表示．得 σ_c^{-1}=500,518,587,724．然后按凝聚到基态的粒子数 $N_c = N - N_2$，对 $(\sigma/\sigma_c)^{-1} = (T/T_c)$ 作图，如图 3-6 所示．由此图看出，与理想情形（将 $\varepsilon_p = \varepsilon_q = \varepsilon_r = 1$ 时，(3-44) 式中的 $\sum'$ 用积分代替）$1-(T/T_c)^{3/2}$ 相近，但有差别．故 g 的影响主要体现在临界温度 $T_c \propto \sigma_c^{-1}$．$g$ 的增大，亦即 n_g 的增大，对应的临界温度 T_c 也随之增大，这与图 3-5 显示的 g 的增大，激发态能容纳的原子数 N_2 的减少是一致的．这也与文献[80]给出的均匀非理想玻色气体的转变温度相对于理想玻色气体的转变温度 T_0 的变化关系(3-12)式随相互作用的增强或密度的增加而提高的结果是一致的．

3.6 与局域密度近似模型的比较

近年 T.T.Chou 等在文献[84]中采用局域密度近似(local density approximation LDA)来处理势阱中原子的 BEC 问题，并在文献[85]中引进局域逸度 $\zeta(\vec{r}) = z\exp(-\beta V)$,式中 z 为原子逸度 $z = \exp(\mu / KT)$,μ 为化学势．最后求得势阱中原子气体的坐标-动量分布

$$h^3\rho(\vec{r},\vec{p}) =<< n_k >>=$$

$$\frac{\zeta\,e^{-\beta\varepsilon_\alpha}}{1-\zeta\,e^{-\beta\varepsilon_\alpha}}-4\bar{a}\lambda^2\rho(r)\frac{\zeta e^{-\beta\varepsilon_\alpha}}{(1-\zeta\,e^{-\beta\varepsilon_\alpha})^2} \tag{3-46}$$

我们就上面的密度动量分布公式与我们求得的结果进行比较．首先在我们的计算中已取定势场 $V=0$ 代入局域逸度公式，得 $\zeta=z=e^{-\alpha}$．参照(3-45)式，故得激发态的动量分布为

$\rho_{p,q,r}=\dfrac{z\,e^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}{1-z\,e^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}$ 式中不包括 $p=q=r=1$ 情形．为简单起见，我们取 $q=r=1$，$p=n$，$n=2,3,4,\cdots$，并令 $\tilde{z}=ze^{-\sigma\varepsilon_1}$，则

$$\rho_n=\frac{\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2\varepsilon_n}}{1-\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2\varepsilon_n}}=\frac{\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2}\,e^{-\sigma n^2(\varepsilon_n-1)}}{1-\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2}\,e^{-\sigma n^2(\varepsilon_n-1)}}\approx$$
$$\frac{\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2}}{1-\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2}}(1-\sigma n^2(\varepsilon_n-1)\frac{1}{1-\tilde{z}\,e^{-\sigma n^2}}) \tag{3-47}$$

将(3-46)与(3-47)式比较，得 $\sigma n^2(\varepsilon_n-1)=4\lambda^2\bar{a}\rho$，并应用(3-33)式进一步写为

$$R\equiv\frac{\sigma n^2(\varepsilon_n-1)}{n_g^2}=\frac{4\dfrac{2\pi\hbar^2}{mKT}\dfrac{\pi a}{4N}\dfrac{N}{a^3}}{\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2KT}}=4 \tag{3-48}$$

当 n_g,n 给定后，便可根据解析解求出 ε_n，并按(3-48)式的定义算出 R．图 3-7 给出 R 随 n_g 的变化关系，n 为参量，由图看出 R 的值基本上在 3 附近变化，与 4 的偏差可能是硬球模型中系数 $4\lambda^2\bar{a}$ 的导出是应用了球对称的 s 波函数假定[86]，而

我们立方体腔的本征函数并不具球对称性. 若将硬球半径 $\bar{a}$ 修正为同体积的正方体边长 $\bar{\bar{a}}$，则 $\bar{\bar{a}}=(\pi/6)^{1/3}\bar{a}$，亦即用 $\bar{\bar{a}}$ 代替(3-48)式中的 $\bar{a}$，则(3-48)式中的 $R\approx 3.2$，这样与解析解更为接近. 但严格说来 R 应是 n 的函数，即 $R=R(n)$，而式(3-46)和(3-47)原本均是一级近似结果. 关于凝聚体动量分布公式的比较情形较为复杂，主要因为 LDA 用的能级 $\hbar\omega_k$ 是声子谱，与凝聚体密度 ρ_s 有关，亦即与 KT 有关；而我们的能级 $p^2\varepsilon_p$ 仅与 g 和腔尺寸 a 的数值有关，与温度无关.

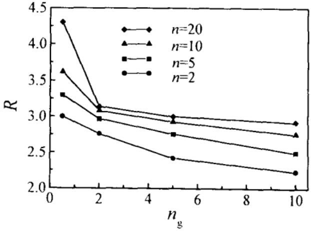


图 3-7　n =2,5,10,20 时，R 随 n_g 的变化关系

3.7 小 结

本章提出了解有排斥相互作用情形中性原子玻色－爱因斯坦凝聚的一般方法. 即是包括凝聚体与非凝聚体在一起求统计平均，根据系统的态函数及能量本征值，按一般的统计力学方法计算配分函数，再求粒子数，由处于基态

的原子数 N_0 判定是否已发生玻色－爱因斯坦凝聚. 由求得的波函数和能量本征值的解析解，估算了这种非理想气体 BEC 的临界温度随原子间相互作用大小和原子密度的变化情况，得出排斥相互作用增大，将使得激发态能容纳的原子数 N_2 减少，临界温度 T_c 升高；并与局域密度近似模型的结果作了比较.

第四章 简谐势阱中有排斥相互作用中性原子的 BEC

4.1 引 言

碱金属原子（$^{87}Rb, ^{23}Na, ^{7}Li$）气体的玻色-爱因斯坦凝聚实验的实现是通过激光冷却、蒸发冷却磁阱中的原子而观察到的，其中铷与钠的散射长度 $\overline{a}$ 为正，当原子靠得很近时，表现出排斥作用，对于实现稳定的凝聚态是有利的，而锂原子的散射长度 $\overline{a}$ 为负，不利于实现稳定的凝聚态. 有关的实验现象为对在势阱中中性原子实现 BEC 进行更为广泛而深入的理论探索提供了可能. 情形也的确是这样的，几乎与此同时就有关于磁阱中中性原子所满足非线性薛定格方程(NLSE)定态解的研究[87]，稍后不久又有 NLSE 非定态解的研究[88]，这些本应成为 BEC 研究的基础，但初步看来，该文似乎存在本章中将提到的一些问题，计算步骤也的确复杂些. 实际上文献[5]作者也已指出文献[87]的“方法不妥，结果可疑”. 还有另外一个重要方面，即现在发表的 NLSE 的解主要是基态，对激发态则很少有报道,从全面理解 BEC 的形成和发展过程，对基态研究固然重要，对激发态研究也是不可缺少的，这对凝聚态的稳定性研究有重要意义. 在本章中给出一种数值求解 NLSE 的方法[89]，讨

论非线性定态薛定格方程的波函数收敛与归一化问题，最后给出简谐势阱中中性原子的 NLSE 的基态和激发态解，对计算精度进行了分析，与大 N 极限下基态能量进行了比较.

4.2 非线性薛定谔方程及其数值求解方法

根据(3.5)式，对于简谐势场 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2$ 中的中性原子体系，其有效哈密顿为

$$H=\int \mathrm{d}^3 r\Psi^*(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2+\frac{2\pi\hbar^2\bar{a}}{m}|\Psi|^2)\Psi \qquad (4\text{-}1)$$

为了导出凝聚波函数满足的方程，使用海森堡方程写出场算子 Ψ 的时间演化方程为

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}&=[\Psi,H]= \\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2\Psi+U_0|\Psi|^2\Psi \end{aligned} \qquad (4\text{-}2)$$

其中 $U_0=4\pi\hbar^2\bar{a}/m$，在绝对温度 T=0，玻色场算子 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 就是凝聚体波函数，仍用 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 表示归一的凝聚体波函数，则得到

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=&-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+ \\ &NU_0|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\Psi(\boldsymbol{r},t) \end{aligned} \qquad (4\text{-}3)$$

其中 m 为单原子质量，ω_T 为简谐势角频率，N 为凝聚体的原子数. 这个方程就是 Gross-Pitaevskii 方程，即非线性薛定谔方程(NLSE)，它是 1961 年由 Gross 和 Pitaevskii 分别

独立导出的．实际上第三章已经通过能量泛函的变分导出了这个方程．

为求定态解，设$\Psi(r,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar}\Psi(r)$　（μ是体系的化学势）代入(4-3)式可得$\Psi(\boldsymbol{r})$满足的方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}m\omega_T^2r^2\Psi(\boldsymbol{r})+NU_0\left|\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2\Psi(\boldsymbol{r})=\mu\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{4-4}$$

对球对称的 s 波函数，方程(4-4)可以简化，采用没有相互作用情形简谐振子基态长度单位$\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)^{1/2}$和谐振子能量单位$\hbar\omega_T$进行归一化，令：

$$r=\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)x,\quad \beta=\frac{\mu}{\hbar\omega_T}$$

$$\Psi(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)^{3/4}}\frac{\Phi(x)}{x} \tag{4-5}$$

注意到

$$NU_0\frac{1}{4\pi\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)^{3/2}}\frac{1}{\hbar\omega_T}\frac{\Phi^2(x)}{x^2}=C_0\frac{\Phi^2(x)}{x^2} \tag{4-6}$$

式中

$$C_0=\frac{2N\overline{a}}{\left(\frac{\hbar}{2m\omega_T}\right)^{1/2}} \tag{4-7}$$

与文献[88]的非线性常数$C_{nl}^{3d}=2N\overline{a}(2m\omega_T/\hbar)^{1/2}$是一致的．

于是由式(4-4) ~ (4-6) 得:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\beta-\frac{x^2}{4}-C_0\frac{\Phi^2(x)}{x^2}\right)\Phi(x)=0 \tag{4-8}$$

归一化条件为:

$$4\pi\int_0^\infty \Psi^2(r)r^2\,dr=\int_0^\infty \Phi^2(x)\,dx=1 \tag{4-9}$$

式中各量均是无量纲的，而(4-3)式中的 NU_0 等也包含到参量 C_0 中去了. 当 $C_0\to 0$ 时，(4-8)式就是简谐振子方程，其本征值 $\beta=n+\frac{1}{2}$，考虑到 $\frac{\Phi(x)}{x}$ 在 $x\to 0$ 附近应为有限的，n 只能取奇数，$n=1,3,5,7,\cdots$，$n=1$ 为基态，$n=3,5,7,\cdots$ 为激发态. 若 C_0 不为零且给定后，β 就是定态 NLSE 方程(4-8)的本征值，它的取值应能保证: (i) 当 $x\to\infty$ 时，$\Phi(x)\to 0$; (ii) 当 $x\to 0$ 时，$\Psi(x)\propto\frac{\Phi(x)}{x}$ 是有限的. 在 $x\to 0$ 附近，$\Phi(x)$ 可表示为:

$$\Phi(x)\approx\Phi(0)x \quad (x\to 0) \tag{4-10}$$

在实际数值求解方程(4-8)时，我们将它写为两个一阶方程

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi}{dx}&=y\\ \frac{dy}{dx}&=(-\beta+\frac{x^2}{4}+C_0\frac{\Phi^2}{x^2})\Phi\end{aligned} \tag{4-11}$$

参照 (4-10)式写出边值条件为

(i) 当 $x\to\infty$ 时

$$\Phi(x)\big|_{x\to\infty}=0,\ y(x)\big|_{x\to\infty}=0 \tag{4-12}$$

(ii) 在 $x\to 0$ 附近

$$\Phi(x)\big|_{x=\varepsilon}=\Phi'(0)\varepsilon,\ \ y(x)\big|_{x=0}=\Phi'(0) \tag{4-13}$$

当 $\Phi'(0)$ 给定后，就可按 Runge-Kutta 方法由 $x=0$ 到 $x\to\infty$ 进行积分，若 β 选择不当，当 $x\to\infty$ 时方程(4-9)的积分是发散的，只有当 β 选择恰当时，才会使得 $\Phi(x)$ 在 $x\to\infty$ 时收敛于零. 还要注意到，既使 $\Phi(x)$ 在 $x\to\infty$ 时收敛于零，这时的 $\Phi(x)$ 也不一定满足归一化条件(4-9)，为了满足归一化条件还要适当选择边界值 $\Phi'(0)$； $\Phi'(0)$ 与 β 并不存在文献[87]给定的关系式 $\Phi'_{\mathrm{c}}(0)=\sqrt{\beta/(NA^2\gamma+1)}$ （这里 $NA^2\gamma$ 即我们方程中的参量 C_0 ），因为解 $\Phi(x)$ 在 $x\to\infty$ 处收敛于零并满足归一化条件就已将 $\Phi'(0)$ 与 β 完全确定了，就不可能满足如文献[87]给定的上述关系. 下面具体计算后还要分析这个问题.

4.3 基态解

我们利用前面的方法计算了基态波函数和基态能量(本征值 β_1)，在实际计算中将非线性参数 C_0 的取值范围定为 0.1~150，略大于文献[88]的取值范围 0.1~100. 求解精度为 $\mathrm{eps}=10^{-4}$ ，按(4.12)及(4.13)式即

$$\sqrt{\Phi^2(x)+y^2(x)}\ \Big|_{x\to\infty}<\mathrm{eps} \tag{4.14}$$

$$\left|\int_0^\infty \Phi^2(x)\,\mathrm{d}x-1\right|<\mathrm{eps} \tag{4-15}$$

所求得的基态波函数的数值结果如图 4-1 所示，横坐标以谐振子基态长度为单位．可以看出：基态波函数的分布随 C_0 的增大逐渐变宽为超高斯型，对 $C_0 = 100$ 进行数值拟合，其基态波函数近似为 $0.25\times\exp\{-(x/4.5)^{3.4}\}$，此时的波函数的宽度为 4~5 谐振子基态长度单位．按文献[2]给出的实验参数，对 Na 原子，$m = 3.841\times10^{-26}$ kg，$\omega_T = 2\pi\times235\ \mathrm{s}^{-1}$，则谐振子长度单位为 0.96 μm，凝聚原子的实际空间分布约为 $2\times0.96\times4.5\approx10$ μm，按文献[2]给出的势阱体积 $10^{-8}\ \mathrm{cm}^{-3}$，可算出阱的大小为 $(10^{-8}\ \mathrm{cm}^3)^{1/3}\approx20$ μm，二者可以比拟．基态能量随 C_0 的变化曲线如图 4-2 中实线所示，当 C_0 增大，即凝聚体的原子数增多时，其体系的单粒子本征能量随之增大，这是凝聚原子之间的排斥作用的反映．

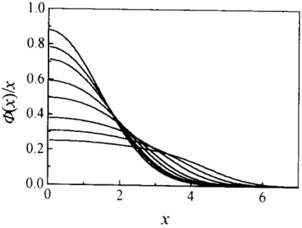


图 4-1 非线性常数 C_0 分别为 0.1,1.5,10,25,50,100,150 的 BEC 基态波函数（按宽度增加的顺序）

基态能量的数值拟合表明它与非线性系数有如下关系

$$\beta=(C_0+1.5^{5/2})^{2/5} \tag{4-16}$$

或写成

$$\mu(N)=\hbar\omega\left(2N\overline{a}/(\hbar/2m\omega)^{1/2}+1.5^{5/2}\right)^{2/5} \tag{4-17}$$

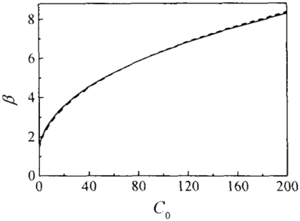


图 4-2　基态能量随非线性常数 C_0 的变化

实线为数值解结果，虚线为(4-17)的计算结果

现在分析文献[87]的算法，他们所用的边界值是 $\Phi'_c(0)=\sqrt{\beta/(1+C_0)}$，而我们的 $\Phi'(0)$ 是作为数值求解的调整参数使得波函数归一化得到的，为了与文献[87]的结果进行比较，我们在图 4-3 中给出了对每一个非线性参数 C_0 求得的定态解的 $\Phi'(0)$ 与 C_0 的关系曲线，图中用虚线来表示，按文献[87]公式 $\Phi'_c(0)=\sqrt{\beta/(1+C_0)}$ 算得的 $\Phi'_c(0)$ 与 C_0 的关系，图中用点线表示；以及比值 $\Phi'(0)/\Phi'_c(0)$ 用实线表示．很明显，当 C_0 很大时，$\Phi'(0)/\Phi'_c(0)\to 1$，文献[87]的公式 $\Phi'_c(0)$ 可用，但当 C_0 较小时，$\Phi'(0)/\Phi'_c(0)$ 远远偏离于 1,

$\Phi'_c(0)$ 是不可用的. 若用了 $\Phi'_c(0)$，则波函数不可能做到归一化.

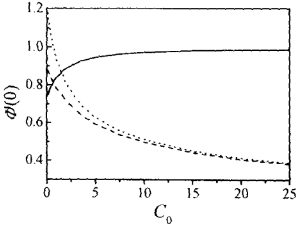


图 4-3 边界值 $\Phi'(0)$ 随非线性常数 C_0 的变化
虚线是我们计算中使用的边界值 $\Phi'(0)$，
点线为文献[87]中的边界值 $\Phi'_c(0)=\sqrt{\beta/(1+C_0)}$，
实线为二者之比

现在就文献[87]中图 1 的参数 $\beta=\dfrac{\mu}{\hbar\omega_T}=4.3$ 进行实例计算，比较我们的与 Edwards Burnett (下面简称为 E.B.)的计算方法. 按我们的方法，根据上面图 4-2 的 β 与 C_0 关系曲线及进一步的计算可得，当 $\beta=4.3$ 时，$C_0=34.372365$，波函数 $\Phi(x)$ 随 x 的变化如图 4-4 中的实线所示，满足归一化 $\int\Phi^2(x)\,\mathrm{d}x=0.999993$. 按 E.B.方法，$\Phi'_c(0)=\sqrt{\beta/(1+C_0)}$ 及波函数在 x 为很大时收敛，求得 $C_c=20.33642$，波函数 $\Phi_c(x)$ 随 x 的变化为图 4-4 中的虚线，不满足归一化条件，

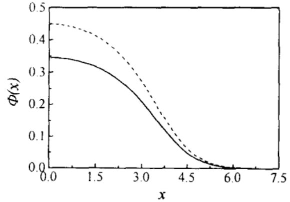


图 4-4 本征值 β = 4.3 的 BEC 基态波函数
实线为 $\Phi(x)$，虚线为 $\Phi_c(x)$，
点划线为 $\sqrt{C_c/C_0}\,\Phi_c(x)$（与实线重合）

而 $\int \Phi_c^2(x)\mathrm{d}x = 1.69018$. 但这只是 E.B.方法的第一步，即找出 $\Psi_0 = \frac{A_0}{r}\Phi_c(N_0, A_0, r)$，为了归一化，E.B. 将 Ψ_0 修改为 $\Psi_1 = \frac{A_1}{r}\Phi_c(N_0, A_0, r)$，$A_1 = \sqrt{\frac{N_0}{N_1}}A_0$ 即文献[87]中的(4-11)式，于是

$$4\pi\int \Psi_1^2 r^2\,\mathrm{d}r = \left(\frac{A_1}{A_0}\right)^2 \int \Phi_c^2(x)\mathrm{d}x = \frac{N_0}{N_1}\int \Phi_c^2(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{4-18}$$

按(4-7)式，$\frac{N_0}{N_1} = \frac{C_c}{C_0} = 0.769188$，代入(4-18)式是满足的．波

函数 $\sqrt{\frac{C_c}{C_0}}\Phi_c(x)=\frac{A_1}{A_0}\Phi_c(x)$ 在图 4-4 中用点划线表示，与我们求得的 $\Phi(x)$ 重合．由此看出 E.B.方法引用不适当的边界条件 $\Phi'_c(0)=\sqrt{\frac{\beta}{(1+C_0)}}$ ，没有达到归一化，而在第二步中得到修正．很明显 E.B.方法通过计算一个参数为 N_0 的系统，反求得参数为 N_1 的系统的解，即求解用到的参数 N_0 并非实际系统的参数 N_1，而 N_1 在计算完成之前是不知道的．若 N_1 给定，则需计算许多 N_0 去试探，看哪一个与实际要求的 N_1 相近，而选择该 N_0 试探中的对应解．而我们的方法就是从实际系统出发求本系统的解，即根据给定的 N_1 由(4-7)式求出 C_0，然后在波函数满足归一化及在 x 为很大时收敛两个条件下求解方程(4-11)直接得出本征值 β 及相应的波函数，故不存在上述问题．

4.4 激发态解

线性化的 GP 方程（即将含时的 GP 方程经过 Bogoliubov 变换得到耦合方程）的解是凝聚体的简正模式，也称为宏观量子系统的元激发和准粒子．集体激发则是服从流体动力学方程的大范围的密度涨落．这种准粒子的寿命由形状振荡的阻尼来确定，实验上的阻尼时间约为 250ms，目前还没有理论期望值．BEC 元激发的研究的最终目的是集体激发谱的完整描述，包括准粒子寿命，和不同温度与高激发能量条件下的行为．BEC 的激发起因是密度涨落或捕陷势的含时微扰．无相互作用的理想气体所有模式的频率都是简谐势频率 ν_0 的整数倍．在均匀弱相互作用密度为 n_0 的玻色凝聚体中，最低频率的激发便是在 $T=0$ 以声速 $v=\sqrt{n_0U_0/m}$ 传播的声子．在

非均匀凝聚体中最低的激发频率正比于ν_0，与n_0无关，因为声速和凝聚体大小对n_0的依赖关系恰好相消．对各向同性的简谐势最低的简正模式的频率为$\sqrt{2}\nu_0$[63]．对于大于平均相互作用能的激发频率，预计会发生从集体到单粒子跃迁的行为．我们下面将通过定态的 GP 方程给出原子在简谐势阱的激发态上的凝聚，在凝聚形成过程中或 BEC 激发中部分地处于这种态的几率是存在的．

根据前面的数值解法，对球对称的激发态作类似的计算，对于不同的非线性常数C_0分别求得了n=3,5,7,9,11,13的激发态解$\Phi_n(x)$和β_n． 图 4-5 给出了非线性常数C_0分别为0.1,1,5,10,25,50,100,150的 n=3 的 BEC 激发态波函数，除有一个节点外，同基态波函数类似，其分布随C_0的增大逐渐变宽．图 4-6 给出了$C_0=100$，n=3,5,7,9,11,13的 BEC 激发态波函数，都具有超高斯分布特征，节点数为$\frac{n-1}{2}$． 图 4-7 给出了n=3,5,7,9,11,13的激发态能量β_n随C_0的变化，各能级的本征能量随C_0增大而增大，但在相同C_0条件下，不同激发态能级与前一能级之差是不同的，随能级升高增量变小，如图 4-8 所示，它给出了n=3,5,7,9,11,13的激发态能量β_n与前一能级β_{n-2}之差随C_0的变化关系．可近似地表示为$\Delta\beta_n=\beta_n-\beta_{n-2}=2-\alpha/n^{0.8}$，$\alpha$与$C_0$有关，当$C_0=150$时，$\alpha=1.19$．

为了达到给定的求解精度$\mathrm{eps}=10^{-4}$，对$\Phi'(0)$精度调整到$10^{-4}\sim10^{-5}$就能满足波函数归一化的精度要求(4-15)式．而要满足(4-14) 式，对β_n调整精度要更高，且随所选$x\to\infty$的边界值的增大而变高，因为C_0的增大和激发态的升高都会使波函

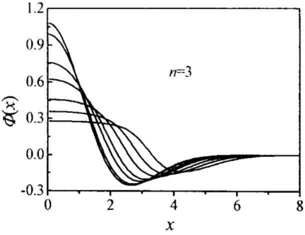


图 4-5　非线性常数 C_0 分别为 0.1,1,5,10,25,50,100,150 的 $n=3$ 的 BEC 激发态波函数（按宽度增加的顺序）

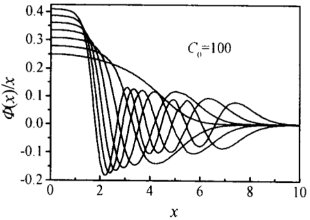


图 4-6　非线性常数 $C_0=100$、n=3,5,7,9,11,13 的 BEC 激发态波函数（按 $\Psi(0)$ 值由小到大的顺序）

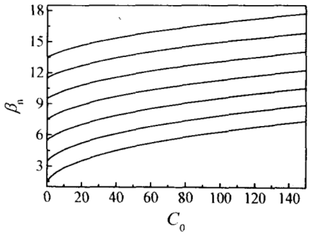


图 4-7　n=3,5,7,9,11,13 的激发态能量 β_n 随非线性常数 C_0 的变化（按自下而上的顺序）

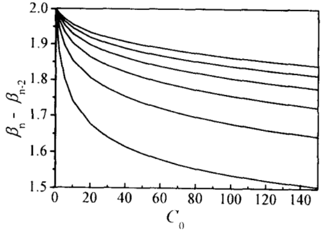


图 4-8　n=3,5,7,9,11,13 的激发态能量 β_n 与前一能级 β_{n-2} 之差随 C_0 的变化（按自下而上的顺序）

数分布逐渐变宽. 例如基态的实际计算中随C_0的增大选取边界值$x=8\sim 10$，而对$n=13$的激发态随C_0的增大选取边界值$x=11\sim 12$. 波函数的收敛性对本征值β_n和边值$\Phi'(0)$的依赖性随C_0的增大变得越来越敏感，亦既C_0较小例如$C_0<10$，较容易调整β_n使积分收敛满足(4-14)和(4-15)式，但当$C_0>50$时，对β_n的调整就须更精细，才能达到收敛.

4.5 与大N极限下基态能量的比较

由不同C_0的基态波函数可以看出，随着凝聚原子数N的增大，中心密度变得越来越平，波函数分布宽度增加. 因此，NLSE (4-4) 中的动能项的贡献仅在边界附近较明显，且相对于相互作用项随N的增大变得越来越不重要. 为研究大N极限的情况，我们略去 NLSE (4-4) 中的动能项，有

$$\frac{1}{2}m\omega_T^2r^2\Psi(\vec{r})+NU_0\left|\Psi(\vec{r})\right|^2\Psi(\vec{r})=\mu\Psi(\vec{r}) \tag{4-19}$$

对于$r<r_c=\left(\frac{2\mu}{m\omega_T^2}\right)^{1/2}$，它有解$\left|\Psi(r)\right|^2=\frac{\mu-\frac{1}{2}m\omega_T^2r^2}{NU_0}$，在这个区域$\mu>V_{\text{ext}}(r)$. 而在区域$r>r_c$，$\left|\Psi(\vec{r})\right|^2=0$. 这就是著名的托马斯-费米近似. 波函数的归一化条件可用来确定化学势μ与粒子数之间的关系:

$$\mu(N)=\left(\frac{15NU_0}{8\pi}\right)^{2/5}\left(\frac{1}{2}m\omega_T^2\right)^{3/5}=\hbar\omega_T\left(\frac{15Na}{8(\hbar/2m\omega_T)^{1/2}}\right)^{2/5} \tag{4-20}$$

当N很大时，我们将前面的数值解拟合结果(4-17)式中的$1.5^{5/2}$略

去，与上式比较可以看出，二者幂指数相同，幂底数接近，但有差别. 这是由于在所计算的 N 值的范围内，动能项虽随 N 的增大而减小但还不能忽略，如图 4-9 中实线所示.

为讨论化学势与能量的关系，我们将(4-1)式写成如下形式

$$E = E_{\mathrm{kin}} + E_{\mathrm{po}} + E_{\mathrm{int}} \tag{4-21}$$

三部分能量分别随凝聚原子数 N 的变化关系如图 4-9 所示. 直接积分(4-4)式，可求得

$$\mu = (E_{\mathrm{kin}} + E_{\mathrm{po}} + 2E_{\mathrm{int}})/N \tag{4-22}$$

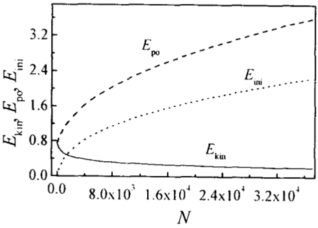


图 4-9　凝聚体各部分能量随 N 的变化关系
实线为动能 E_{kin}、虚线为势能 E_{po}、点线为相互作用能 E_{int}

实际 BEC 实验中的检测是通过突然关闭势阱，让发生凝聚的原子云自由扩散，用 CCD 对原子气体的探测光成象，图象数值化处理可以得到原子云速度分布. 对原子速

度分布的积分可得到原子的动能，这个能量被称为释放能，它是在自由扩散刚开始时原子的动能和相互作用能之和[63]

$$E_{\rm rel}=E_{\rm kin}+E_{\rm int} \tag{4-23}$$

因此，当 N 很大时，释放能主要来自相互作用能. 此外，根据 $\mu=\partial E/\partial N$ ，由(4-17)可求得

$$\frac{E}{N}=\frac{5}{7}\mu\{1+\frac{1.5^{5/2}}{(\mu/\hbar\omega_T)^{5/2}-1.5^{5/2}}+\frac{1.5^{7/2}}{((\mu/\hbar\omega_T)^{5/2}-1.5^{5/2})(\mu/\hbar\omega_T)}\}, \tag{4-24}$$

以及由式(4-20)可求得

$$\frac{E}{N}=\frac{5}{7}\mu \tag{4-25}$$

能量 E 与化学势 μ 之间的关系画在图 4-10 中，对于所计算

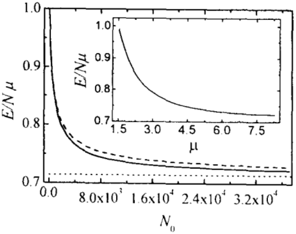


图 4-10 能量 $E(\mu)/N\mu$ 与化学势 μ 之间的关系

实线为数值解结果. 虚线为(4-24)式的结果. 点线为为(4-25)式的结果

的大 N，(4-24) 式的结果已接近托马斯-费米近似 (4-25)式的结果，即略去动能项的贡献．这时(4-23)式的释放能为

$$\frac{E_{\mathrm{rel}}}{N}=\frac{2}{7}\mu \tag{4-26}$$

4.6 小 结

本章给出了非线性定态薛定谔方程一种数值求解方法，即对非线性微分方程进行数值积分时，调整波函数的边界值 $\Phi'(0)$ 和本征值 β，使 $\Phi(x)$ 在 $x\to\infty$ 时收敛于零和归一化条件都得到满足．并求解了简谐势阱中中性原子的非线性定态薛定谔方程基态和激发态解．计算了基态和激发态的能量本征值 β_n，边值 $\Phi'(0)$ 及空间分布．讨论了参数 $\Phi'(0)$，β 的确定与积分收敛及波函数归一化的关系．

第五章　吸引相互作用对 BEC 的影响

5.1 引 言

势阱中 ^{7}Li 原子气体的玻色－爱因斯坦凝聚实验[3,23]为这种宏观量子现象的研究提供了新的素材. 锂原子的凝聚机制倍受重视，因为锂原子的散射长度 $\bar{a}$ 是负的，这就意味着原子间有吸引相互作用. 一般认为锂原子均匀体系不能形成稳定的 BEC 态[90,91]，这是因为原子间的吸引相互作用将引起凝聚体的崩塌. 然而，具有吸引相互作用的中性原子体系在空间束缚条件下可以形成亚稳的 BEC 且凝聚体的原子数 N_0 小于某个临界值 N_c,文献[26,28,29]预期在充分少的原子数或非常弱的原子间相互作用条件下凝聚体是稳定的，当这些条件不满足时的凝聚体的衰变和崩塌也有几位作者讨论[28,30,92]. Kagan [26] 从稍不同的论点出发指出：具有很大负散射长度的俘获气体团簇的形成是不稳定的，原子间的吸引使其存在更稠密的 N 原子态. Stoof [92] 讨论了这种吸引型 BEC 的热诱导崩塌，文献[28,30]估计了宏观量子隧道（MQT）的速率. 由 MQT 速率可进一步近似确定吸引型 BEC 的寿命. 然而，随着实验精度的提高，可靠的理论计算是必要的. 本文中我们给出有吸引相互作用的中性原子体系的能级和态函数在一维箱势中的解析解[93]，分析原子间的吸引作用对能级和波函数的影响，并与排斥相互作用情形中性原子体系的解

进行比较. 通过直接数值求解球对称简谐势阱中的非线性定态薛定谔方程, 求得系统的能量本征值和波函数随凝聚原子数变化关系. 类似于排斥势情况, 求解三维简谐势阱中有吸引相互作用体系的 NLSE 的严格解[94], 计算密度涨落对 BEC 化学势的影响. 给出了一个严格可解的宏观量子隧道模型[95] 计算了从亚稳凝聚态到塌缩态的宏观量子隧道速率, 研究吸引型 BEC 的稳定性.

5.2 负散射长度的计算与测量

按分波法, 弹性散射的相移的计算公式为[75]

$$\tan\delta_l = -k\int_0^{\infty} j_l(kr)V(r)R_l(r)r^2\,\mathrm{d}r \tag{5-1}$$

式中 δ_l 为 l 波相移, $j_l(r)$ 为球贝塞耳函数, $V(r)$ 为中心势, $R_l(r)$ 为径向波函数. 将渐近的径向波函数 $R_l(r)\sim\sin(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l)$ 代入(5-1)式即是相移的积分方程. 一旦知道了原子靠近时的相互作用势 $V(r)$ 的形式, 就可以求得相移 δ_l, 从而由(3.1)求得散射长度 $\overline{a}$.

文献[96]使用半经典近似对原子间相互作用势能有渐近形式 $V(r)\approx-\dfrac{\alpha}{r^n}$ 的原子-原子弹性散射进行了计算, 求得的散射长度为

$$\overline{a}=\cos\left(\frac{\pi}{n-2}\right)\left(\frac{\sqrt{2M\alpha}}{\hbar(n-2)}\right)^{\frac{2}{n-2}}\frac{\Gamma\left(\dfrac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n-1}{n-2}\right)}\times\left[1-\tan\left(\frac{\pi}{n-2}\right)\tan\left(\Phi-\frac{\pi}{2(n-2)}\right)\right] \tag{5-2}$$

式中$\Phi = \frac{1}{\hbar}\int_{r_0}^{\infty}\sqrt{2M[-V(r)]}\,\mathrm{d}r$， M 是二粒子约化质量.

对于处于基态的 ^{7}Li 原子，相应于 $^7Li_2$ 的 $x^1\Sigma_g^+$ 和 $a^3\Sigma_u^+$ 态的近似势能函数 $V_g(r)$ 和 $V_u(r)$ 分别为[97]

$$V_{g,u}(r) = -\frac{1388}{r^6} - \frac{83230}{r^8} - \frac{7.348\times10^6}{r^{10}} \mp 0.01288 r^{4.558}\,\mathrm{e}^{-1.259r} \tag{5-3}$$

在零能极限下求得[97]相应于势能函数 $V_g(r)$ （ $x^1\Sigma_g^+$ 态）和 $V_u(r)$ （ $a^3\Sigma_u^+$ 态）的散射长度分别为 $36\,a_0$ 和 $-17a_0$， a_0 是玻尔半径.

为从实验上确定 ^{7}Li 原子散射长度 $\bar{a}$，文献[98]通过二光子拉曼过程探测基态分子能级的方法对三重态 $^7Li_2$ $a^3\Sigma_u^+$ 势的最低束缚态的束缚能进行了测量，测得离解能 $D_e = 333.73\pm0.02\,\mathrm{cm}^{-1}$，从而得出处于 $F=2,\ m_F=2$ 三重态 s 波散射长度的值为 $(-27.3\pm0.8)a_0$.

5.3 一维箱势中有吸引作用体系的能级与波函数

参照第三章 (3.24) 式，有弱相互作用中性原子体系的波函数所满足的定态非线性薛定谔方程为:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g|\Psi|^2)\Psi = E\Psi \tag{5-4}$$

式中 $g = Nu$， N 为凝聚原子数， $u = \frac{4\pi\hbar^2\bar{a}}{m}$， $\bar{a}$ 为散射长度，为负值. 由式(5-4)可求出中性原子系统的本征态 Ψ_j 及相应的本征值 E_j. 为简单起见，我们先讨论一维箱势中的原子体系，这时方程(5-4)可写为

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+g|\Psi|^2)\Psi=E\Psi \quad , \qquad 0<x<a \tag{5-5}$$

令 $\Psi=\widetilde{N}^{1/2}\Psi_n$，方程(5-5)变为

$$(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+(k_n^2-2k_g^2)+2k_g^2\Psi_n^2)\Psi_n=0 \tag{5-6}$$

式中 $k_n^2-2k_g^2=2mE/\hbar^2$，$k_g^2=\dfrac{-mg}{\hbar^2 a}\widetilde{N}a\equiv k_{g_0}^2\widetilde{N}a$，$\widetilde{N}\int_0^a\Psi_n^2\,\mathrm{d}x=1$，

$\widetilde{N}$ 为归一化常数．换变数并引入新参量 $\lambda^2=\dfrac{k_g^2}{k_n^2-k_g^2}$，

$\xi=\sqrt{k_n^2-k_g^2}\,x$，(5-6)式变为

$$(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+(1-\lambda^2)+2\lambda^2\Psi_n^2)\Psi_n=0 \tag{5-7}$$

进一步得到

$$\left(\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\mathrm{d}\xi}\right)^2=1-(1-\lambda^2)\Psi_n^2-\lambda^2\Psi_n^4 \tag{5-8}$$

(5-5)式的积分为

$$\xi=\int_0^{\Psi_n}\frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\sqrt{(1-\Psi_n^2)(1+\lambda^2\Psi_n^2)}} \tag{5-9}$$

因此，波函数Ψ_n可用第一类 Jacobi 椭圆函数来表示[83] $\Psi_n=sn(\xi,\mathrm{i}\lambda)$．

通过虚模数变换 $sn(\xi,\mathrm{i}\lambda)=\dfrac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}}sd(\sqrt{1+\lambda^2}\,\xi,\dfrac{\lambda^2}{1+\lambda^2})$，波函数

Ψ_n可表示为

$$\Psi_n = sn(\xi, i\lambda) = \tilde{\lambda}' sd(\frac{\xi}{\tilde{\lambda}'}, \tilde{\lambda}) = \frac{sn(\xi', \tilde{\lambda}^2)}{\sqrt{1+\frac{\tilde{\lambda}^2}{1-\tilde{\lambda}^2}(1-sn^2(\xi', \tilde{\lambda}^2))}} \tag{5-10}$$

式 中 $\xi = \xi'/\sqrt{1-\tilde{\lambda}^2}$，$\tilde{\lambda} = \lambda/\sqrt{1+\lambda^2}$，$\tilde{\lambda}' = \sqrt{1-\tilde{\lambda}^2} = 1/\sqrt{1+\lambda^2}$，函数$sn(\xi', \tilde{\lambda}^2)$有下面的性质

$$sn(\xi' + 4mK + 4m'\mathrm{i}K', \tilde{\lambda}^2) = sn(\xi', \tilde{\lambda}^2) \tag{5-11}$$

式 中 $K(\tilde{\lambda}^2) = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}\Psi_n}{\sqrt{(1-\Psi_n^2)(1-\tilde{\lambda}^2\Psi_n^2)}}$ ， $K'(\tilde{\lambda}^2) = K(1-\tilde{\lambda}^2)$ ，m, m'为整数， $sn(\xi', \tilde{\lambda}^2)$的展开式为

$$sn(\xi', \tilde{\lambda}^2) = \frac{2\pi}{\tilde{\lambda}K}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{q^{j+\frac{1}{2}}}{1-q^{2j+1}}\sin\frac{(2j+1)\pi\xi'}{2K} \tag{5-12}$$

其中$q = \mathrm{e}^{-\pi K'/K}$. 令 $n_g = k_{g_0}a/\pi = \sqrt{-mga}/\pi\hbar$ 和k_g的定义，得到

$$\frac{k_g^2 a^2}{\pi^2} = \frac{-mga}{\pi^2\hbar^2}\tilde{N}a = (k_{g_0}a/\pi)^2\tilde{N}a = n_g^2\tilde{N}a \tag{5-13}$$

由归一化条件， $\tilde{N}a$可表示为

$$\tilde{N}a = \frac{\sqrt{k_n^2 - k_g^2}\,a}{\int_0^{\sqrt{k_n^2-k_g^2}\,a}\Psi_n^2(\xi)\,\mathrm{d}\xi} \tag{5-14}$$

根据$x = 0, a$, $\Psi = 0$的边界条件，即$sn(\frac{1}{\sqrt{1-\tilde{\lambda}^2}}\sqrt{k_n^2 - k_g^2}\,a, \tilde{\lambda}) = 0$，

有量子化条件

$$\sqrt{k_n^2 - k_g^2}\, a = \sqrt{1-\widetilde{\lambda}^2}\, 2nK, n = 1,2,3,\cdots \tag{5-15}$$

考虑到波函数的周期性，则(5-14)式变为

$$\widetilde{N}a = \frac{\sqrt{1-\widetilde{\lambda}^2}\, 2nK}{\int_0^{\sqrt{1-\widetilde{\lambda}^2}\, 2nK} \Psi_n^2(\xi)\,\mathrm{d}\xi} = \frac{\sqrt{1-\widetilde{\lambda}^2}\, 2K}{\int_0^{\sqrt{1-\widetilde{\lambda}^2}\, 2K} \Psi_n^2(\xi)\,\mathrm{d}\xi} \tag{5-16}$$

利用量子化条件(5-15)和 λ 与 $\widetilde{\lambda}$ 的定义式，有 $k_g = 2nK\widetilde{\lambda}/a$ 和 $k_g^2/(k_n^2 - k_g^2) = \widetilde{\lambda}/(1-\widetilde{\lambda}^2)$. 代入(5-13)式得

$$\frac{n_g}{n} = \frac{2K\widetilde{\lambda}}{\sqrt{\widetilde{N}a}\pi} \tag{5-17}$$

当 n_g, n 给定后，由(5-16)，(5-17)式可求出本征值 $\widetilde{\lambda}_n$ 及 $K(\widetilde{\lambda}_n^2)$，便可计算出 k_g 及 k_n 以及能量本征值

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_n^2 - 2k_g^2) = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}\left(\frac{2K}{\pi}\right)^2 (1-2\widetilde{\lambda}_n^2) = \widetilde{E}_n \varepsilon_n \\ \varepsilon_n &= \left(\frac{2K(\widetilde{\lambda}_n^2)}{\pi}\right)^2 (1-2\widetilde{\lambda}_n^2) \end{aligned} \tag{5-18}$$

图 5-1 给出当 n_g 给定后，本征值 $\widetilde{\lambda}_n$ 随 n 的变化曲线. 由这曲线可读出本征值 $\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \widetilde{\lambda}_3, \cdots$. 图 5-2 给出 ε_n 随 n 的变化. 由图看出，与第三章有排斥作用的一维体系的能级变化情况相反，吸引作用体系的能级相对无相互作用体系降低了，基态与低激发态能级对原子间吸引相互作用强度反映灵敏，且随强度增大而

变小以致变为负值，这是原子间吸引相互作用的反映.

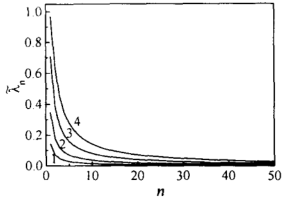


图 5-1　本征值 $\widetilde{\lambda}_n$ 随 n 的变化关系

曲线1, 2, 3, 4 分别对应 $n_g = 0.1$, 0.25, 0.56, 1.0

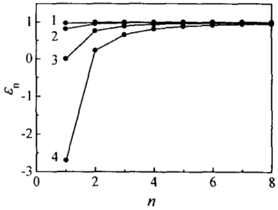


图 5-2　本征值 ε_n 随 n 的变化关系

曲线1, 2, 3, 4 分别对应 $n_g = 0.1$, 0.25, 0.56, 1.0

当 $g \to 0$，即 $\widetilde{\lambda} \to 0$ 时，$K \to \pi/2$，Ψ_n，E_n 趋于熟悉的无相

互作用情况下的波函数 $\widetilde{\Psi}_n = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$ 和能量本征值 $\widetilde{E}_n = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$.

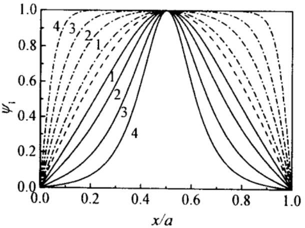


图 5-3 基态波函数随 n_g 的变化关系

实线1, 2, 3, 4 分别对应于 $n_g = \sqrt{-4N\bar{a}/\pi a}$ = 0.75, 1.0, 1.25, 1.5 (吸引势)

点划线1, 2, 3, 4 分别对应 $n_g = \sqrt{4N\bar{a}/\pi a}$ = 0.75, 1.5, 2.5, 5.0 (排斥势)

虚线对应于 $n_g = 0$ （无相互作用）

在图 5-3 中给出了体系在不同 n_g ($g<0$)情况下的基态波函数，为比较，也将第三章 $g>0$ 情况下的基态波函数(3.31)式画在同一图中. 由图看出，随相互作用强度的增大，吸引作用体系的原子空间分布趋于集中，而排斥作用体系的原子分布趋于分散.

5.4 三维箱势中有吸引作用体系的基态解

根据方程(5-4)，半径为 r_0 的球方势阱中 s 波函数 $\Psi(r)$ 满足的方程可写为:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\left(r^2\Psi(r)\right)+g\left|\Psi(r)\right|^2\Psi(r)=E\Psi(r) \tag{5-19}$$

采用无量纲的长度、能量单位，令：

$$\begin{aligned} &r=r_0 x,\quad \beta=2ma^2E/\hbar^2\\ &C_0=2N\bar{a}/r_0\\ &\Psi(r)=(4\pi a_0^3)^{-1/2}\Phi(x)\end{aligned} \tag{5-20}$$

得到：

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\beta-C_0\Phi^2(x)\right)\Phi(x)=0 \tag{5-21}$$

波函数的规一化条件为：

$$4\pi\int_0^{r0}\Psi^2(r)r^2\,\mathrm{d}r=\int_0^1\Phi^2(x)x^2\,\mathrm{d}x=1 \tag{5-22}$$

波函数 $\Phi(x)$ 满足的边界条件是：

$$\Phi(x)\big|_{x=1}=0\,,\quad \Phi(x)\big|_{x=\varepsilon}=\Phi(0),\Phi'(x)\big|_{x=\varepsilon}=\varepsilon,(\varepsilon=10^{-4}) \tag{5-23}$$

应用 4.2 节中的数值计算方法， 方程(5-19)满足条件方程(5-22),(5-23)的数值解画在图 5-4 ~图 5-6 中.

图 5-4 给出非线性系数 C_0 随基态能量 β 的变化关系. 当 $\beta=-0.225$ 时，非线性系数有一极小值 $C_{0\min}=-0.65276$，由此和方程(5-20) 可以推出临界原子数 N_c,它是吸引型 BEC 能容纳的最大原子数. 为与实验比较，取实验数据[2] $|\bar{a}|=1.45\ \mathrm{nm}$，$r_0=5\,\mu\mathrm{m}$，可得出 $N_c=r_0C_{0\min}/\bar{a}=1080$. 这与简谐势阱中临界的凝聚原子数 1300 [23,88] 是同一量级.

对每一个 $C_0>C_{0\min}$ 都对应具有不同本征值的两个本征态，如图 5-6 中的波函数曲线 1 与 1' 分别对应 $\beta=5.14$ 和 -10.27，但它们

对应同一个非线性系数 $C_0=-0.45$ ，或说它们有相同的原子数. 这表明给定原子数的吸引相互作用体系存在双稳态. 对于能量本征值 $\beta>-0.225$ 的态，凝聚体原子数随本征能量 β 的增加而减少. 而对

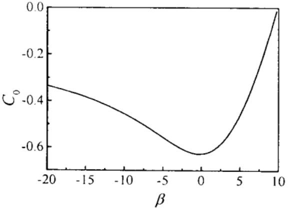


图 5-4　非线性系数 C_0 与能量本征值 β 的关系

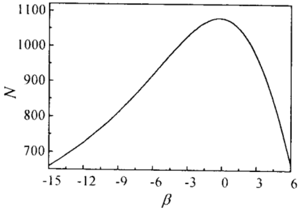


图 5-5　凝聚原子数 N 与能量本征值 β 的关系

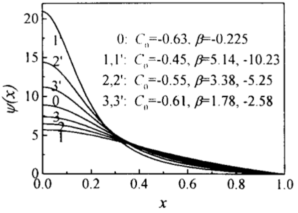


图 5-6　不同非线性系数 C_0 和能量本征值 β 的基态波函数

于 $\beta < -0.225$ 的态，凝聚体原子数随 β 的减少而减少，但原子的空间分布越来越集中，如图 5-6 所示，波函数曲线 3', 2', 1' 分别对应 $\beta = -2.5788, -5.2523, -10.2274$. 我们的这个结果类似于简谐势阱中吸引相互作用体系非线性薛定谔解的稳态和不稳态分支 [99]. 因此球形箱势中吸引型 BEC 在压缩的空间分布、临界原子数和凝聚体的亚稳特性等方面类似于简谐势中的同类体系.

5.5 有吸引相互作用的中性原子的 BEC 计算

由 5.3 节的结果可以看出，在一维情形吸引势的 BEC 并不受限制，而 5.4 节三维箱势和后面简谐势阱中的数值结果都表明，吸引作用使得三维非线性薛定谔方程在当非线性系数或 BEC 原子数要充分小时，方程才有解. 为了定性地研究原子间吸引相互作用对 BEC 的影响，仍近似地用三个一维解构成三维情形

的结果，但应当考虑三维情形中原子数或非线性系数的限制，为此我们取基态能量为零，由求得的能级公式(5-18)可以看出，这时 $2\tilde{\lambda}_n^2=1$，可求得这时相应于 $n_g=0.56$. 因此，n_g 在 $0\sim0.56$ 的变化范围内研究其对 BEC 影响. 在作凝聚计算时，参照第三章排斥势情况的方法，基态和激发态的原子数分别为

$$N_1=\frac{\omega_0 z}{1-z},$$

$$N_2=\omega_0\sum_{p,q,r=1}{}' \frac{z\quad \mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}}{1-z\quad \mathrm{e}^{-\sigma(p^2\varepsilon_p+q^2\varepsilon_q+r^2\varepsilon_r-3\varepsilon_1)}} \tag{5-24}$$

式中 $\sigma=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2KT}$，$z=\mathrm{e}^{\beta(\mu-3E_1)}$，化学势 $\mu<3E_1$，$j^2\varepsilon_j(j=p,q,q,r=1,2,3,\cdots,)$ 是体系的第 j 能态的能量本征值，和式 $\sum'$ 中不包括 $p=q=r=1$ 的项. 实际计算时，我们将 ω_0 取为 1. 为求得系统发生 BEC 的临界温度 T_c 以及 g 对 T_c 的影响，我们计算了当 $z\to1$ 时 N_2 随 σ^{-1} 的变化关系.计算结果表明：在同一温度下，随吸引势的增强，激发态能容纳的原子数 N_2 略有下降，这与排斥相互作用情况类似，同样因原子间的相互作用，使激发态($n>1$)能量与基态($n=1$)能量之差增大了，这从图 5-2 中 ε_n 随 n 的变化关系可以看出来. 我们取定总原子数为 $N=1250$，改变 σ^{-1} 使按(5-24)式求得的激发态原子数 N_2 为 1250，这时对应的 σ^{-1} 就是凝聚的临界温度，用 σ_c^{-1} 表示. 求得 n_g=0, 0.45, 0.56 对应的 σ_c^{-1} 分别为 $\sigma_c^{-1}=96.9$, 97, 97.15，随吸引势的增强略有增大. 即在所考虑的范围内 g 对临界温度的影响很小.

5.6 简谐势阱中吸引作用体系的基态解

在充分低的温度和外加势场 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2$ 的条件下，弱相互作用玻色子的凝聚体可通过单一波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 来描写，原子间的相互作用由 s-波散射长度 $\bar{a}$ 来表示. 波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 可通过求下面 Gross-Pitaevskii 能量泛函的极小而得到[28]:

$$E(\Psi)=\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\Psi^*(\boldsymbol{r})\times\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2+\frac{2\pi\hbar^2\bar{a}}{m}\left|\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{5-25}$$

对于定态解，这个方程的变分得到有效的非线性薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}m\omega_T^2 r^2\Psi(\boldsymbol{r})+\frac{4\pi\hbar^2\bar{a}}{m}\left|\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2\Psi(\boldsymbol{r})=\mu\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{5-26}$$

式中 μ 是化学势. $\Psi(\boldsymbol{r})$ 的归一化为:

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\left|\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2=N_0 \tag{5-27}$$

其中 N_0 是凝聚体中的原子数. 考虑到 BEC 基态波函数是球对称的, 作变换，使长度和波函数无量纲化:

$$\begin{aligned} r&=\left(\hbar/2m\omega_T\right)^{1/2}x\equiv\alpha x,\quad \beta=\mu/\hbar\omega_T \\ C_0&=2N_0\bar{a}/\alpha,\quad \Psi(r)=\left(N_0/4\pi\alpha^3\right)^{1/2}\Phi(x) \end{aligned} \tag{5-28}$$

这样，方程(5-26)有下面的形式

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}+\beta-\frac{x^2}{4}-C_0\Phi^2(x)\right)\Phi(x)=0 \tag{5-29}$$

由(5-27)和(5-28)式，波函数$\Phi(x)$满足的归一化条件为:

$$\int_0^\infty \Phi^2(x)x^2\,dx=1 \tag{5-30}$$

波函数$\Phi(x)$满足的边界条件是$\Phi(x)\big|_{x=\infty}=0, \Phi'(x)\big|_{x=\infty}=0$ 和 $\Phi'(x)\big|_{x=\varepsilon}=0$ $\Phi(x)\big|_{x=\varepsilon}=\Phi(0)$, $(\varepsilon=10^{-6})$.

再次应用 4.2 节的数值计算方法，我们求得了基态波函数$\Phi(x)$和能量本征值$\beta=\mu/\hbar\omega_T$的数值解，画在图 5-7~图 5-9 中.

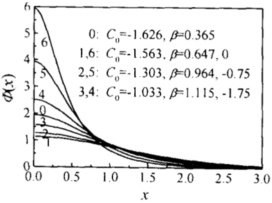


图 5-7 不同C_0和β的基态波函数

图 5-9 给出的基态能量β随非线性系数C_0的变化关系有两个特点，第一，对于所有的非线性系数C_0（或说凝聚原子数），基态能量$\beta\le1.5$. 这表明原子间的吸引相互作用使体系的能量下降了. 第二，在$\beta=0.365$处非线性系数C_0有一极小值$C_{0\min}=-1.62625$, 由此和方程(5-28)可以推出临界原子数N_c，它

是吸引型 BEC 能包含的最大原子数，$N_c = -1.626 \times \alpha / 2\bar{a}$.

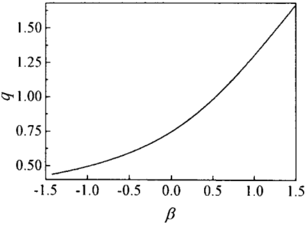


图 5-8 波函数的宽度 q 随本征值 β 的变化

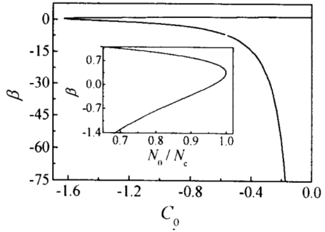


图 5-9 非线性系数 C_0 与能量本征值之间的关系
内插图为能量本征值 β 随凝聚原子数与临界原子数之比的变化关系

当阱的宽度增加时，N_c将随α线性增加，这一结果似乎与均匀气体中不会发生吸引的 BEC 相矛盾，其实，当$\alpha \to \infty$时，凝聚密度N_c/α^3趋于零. N_c和凝聚密度n之间的权衡正是设计实验时所要考虑的.

根据C_0的极小值和实验数据[23] $|\bar{a}|=1.45\ \mathrm{nm}$，$\omega=(\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}=908\ \mathrm{s}^{-1}$，$m_{Li}=1.16\times10^{-23}\ g$，$\alpha=\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}=2.236\ \mu\mathrm{m}$，可得出$N_c=1254$. 这与实验中最大的凝聚体原子数限制在 650 和 1300 之间[23]是相符的. 对每一个$C_0>C_{0\min}$都对应具有不同本征值的两个本征态，如图 5-7 中$C_0=-1.033$相应波函数曲线 1 与 6 分别对应$\beta=1.115$和-1.75，这就是我们所谓的双稳态. 对于能量本征值$\beta>0.364$的态，凝聚体原子数随本征能量β的增加而减少. 而对于$\beta<0.364$的态，凝聚体原子数随β的减少而减少，但原子的空间分布越来越密集，如图 5-7 所示，压缩的波函数曲线 4,5,6 分别对应$\beta=0,\ -0.75,\ -1.75$. 这种压缩的波函数可能与文献[26]提到的稠密态有关. 本征态解表明：对于$N<N_c$具有吸引相互作用的原子体系的 BEC 可以形成.

另外，我们可以求得处于临界原子数状态时平均每个原子的相互作用能为

$$U_m=\frac{2\pi\hbar^2\bar{a}}{N_c m}\int \mathrm{d}^3 r\,|\Psi(\boldsymbol{r})|^4=\frac{N_c 2\pi\hbar^2\bar{a}}{m}\frac{1}{4\pi\alpha^3}\int \mathrm{d}x\,x^2\,|\Phi(x)|^4=\frac{N_c 2\pi\hbar^2\bar{a}}{m}\frac{1}{4\pi\alpha^3}\int \mathrm{d}x\,x^2\,|\Phi(x)|^4=\frac{1.626\times\hbar\omega}{2}\int \mathrm{d}x\,x^2\,|\Phi(x)|^4=0.804\hbar\omega \tag{5-31}$$

由此可见，负相互作用能的数值小于简谐势阱的能级间隔

$\hbar\omega$，以致于相互作用表现为对理想气体的微扰，仍为气体状态；这也可以从物理上理解为什么吸引相互作用体系有一个临界原子数，或说方程（5-29）仅当 $N < N_c$ 时才能找到数值解.

对于能量本征值 $\beta > 0.364$ 的态，凝聚体原子数随本征能量 β 的增加而减少.而对于 $\beta < 0.364$ 的态，凝聚体原子数随 β 的减少而减少，但原子的空间分布越来越密集，如图 5-7 所示，压缩的波函数曲线 4,5,6 分别对应 $\beta = 0,\ -0.75,\ -1.75$. 从原子的空间分布与本征能量的关系看，原子的空间分布随基态能量的降低单调地被压缩，如图 5-8 中 q 随 β 变化的曲线所示，q 是原子分布的宽度，由 $\Phi(q) = \frac{1}{2}\Phi(0)$ 定义. 下面用 $\Phi_q(x)$ 表示宽度为 q 的波函数.

5.7 吸引性 BEC 的稳定性分析

为研究上面所求的两类定态的性质，即凝聚体的稳定性，由于凝聚体的不稳定是密度涨落的结果，涨落将使系统进入更低的能量状态，因为原子间有有效的吸引作用. 为此，我们用基态波函数的宽度来表示凝聚密度，由(5-25)和(5-28)式可求得系统基态能量与凝聚密度的关系

$$E(\Phi_q) = \frac{\hbar^2 N_0}{2m\alpha^2}\int x^2\,\mathrm{d}x\left[4\left(\frac{\mathrm{d}\Phi_q(x)}{dx}\right)^2 + x^2\Phi_q^2(x) + 2\frac{2N_0\bar{a}}{\alpha}\left|\Phi_q(x)\right|^4\right] = \frac{\hbar^2 N_0}{2m\alpha^2}E(q) \equiv N_0 V(q) \tag{5-32}$$

所求得的 $E(q)$ 随 q 的变化关系如图 5-10 所示，计算中使用的是不同凝聚数 N_0 本征解，即图中的密度变化是由于凝聚数 N_0 的变化产生的.

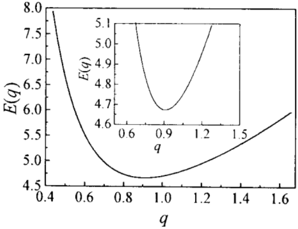


图 5-10 $E(q)$ 随 q 的变化，内插图为局部放大.

为研究给定凝聚数 N_0，因原子的空间分布的涨落对体系稳定性的影响，需要对给定凝聚原子数 N_0 的体系计算泛函 $E(\Phi_q(x))$，波函数的宽度 q 作为变分参数. 给定 N_0 可根据(5-32)式求得 $E(q)$ 随 q 的变化；对于 $N_0/N_c = 0.992, 0.993, \cdots, 1.0$，$E(q)$ 随 q 的变化如图 5-11 中的实线所示. 虚线为各 $E(q)$ 曲线的极值点的轨线，它恰好相应于方程(5-29) $C_0 = 2N_0\overline{a}/\alpha$ 的严格解 $\Phi_q(x)$. 由图可看出，$\beta > 0.365$ 的态在 $E(q)$ 的极小点，称它们为亚稳的 BEC 态，并用 $\Phi_{0,N_0}(x)$ 表示；而 $\beta < 0.365$ 的定态在 $E(q)$ 的极大点，称它们为不稳定的稠密态[26]，表示为 $\Phi_{d,N_0}(x)$.

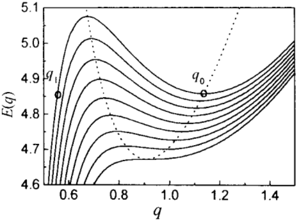


图 5-11 给定 N_0时 $E(q)$ 随 q 的变化关系实线：
$E(q)$ 作为 q 的函数，相应于 $N_0/N_c=0.992, 0.993, \cdots, 1.0$
(由上到下的顺序)，虚线相应于这些曲线的极点轨线

5.8 宏观量子隧道速率的计算

根据宏观量子隧道（MQT）速率的 WKB 近似公式[92]和方程(5-32)，我们得到：

$$\Gamma_0 = A\exp\left\{-2N_0/\hbar\int_{q_0}^{q_1}\mathrm{d}q\left[2m^*(V(q)-V(q_0))\right]^{1/2}\right\} = A\exp\left\{-1.225N_0\int_{q_0}^{q_1}\mathrm{d}q\left[E(q)-E(q_0)\right]^{1/2}\right\} \tag{5-33}$$

式中有效质量 $m^*=3m/2$，q_0 是亚稳极小的位置，q_1 满足 $E(q_1)=E(q_0)$. 利用方程(5-32)的 $E(q)$ 可计算从亚稳态 $\Phi_{q_0}(x)$ 到塌缩态 $\Phi_{q_1}(x)$ 的隧道速率 Γ_0. 图 5-12 中曲线 1 表示 Γ_0/A 随 N_0/N_c 变化的规律. 为比较，将有效势模型[30]导出的隧道速率 $\Gamma_0\propto\exp[-0.57(N_c-N_0)]$ 和高斯型试探波函数[28]假定下计算的

结果 $\Gamma_0 \propto \exp[-(1-N_0/N_c)^{5/4}]$ 画在同一图中. 很明显，严格解曲线 1 比根据文献近似解计算的结果曲线 2、3 随 N_0/N_c 的减小更快地趋于零. 这意味着在临界点附近亚稳凝聚可以很容易地通过宏观量子隧道而进入塌缩态(如图 5-11 中标出的 q_1 点相应的态)；然而，远离临界点时，比 N_c 少几十个原子，这种隧道速率几乎是零，因此凝聚体被期望是稳定的.

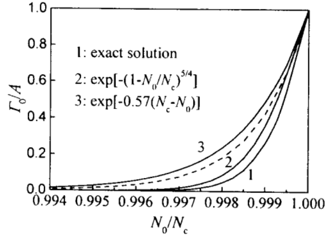


图 5-12　隧道速率 Γ_0/A 随 N_0/N_c 的变化

曲线 1,2,3 分别相应于严格解，$\exp[-(1-N_0/N_c)^{5/4}]$ 和 $\exp[-0.57(N_c-N_0)]$

虚线为亚稳凝聚态 $\Phi_{0,N_0}(x)$ 和稠密态 $\Phi_{d,N_0}(x)$ 之间的交叠积分 I

5.9 跃迁速率的计算

我们根据 Kagan [26] 关于因涨落从亚稳态到稠密态跃迁的激发和决定跃迁速率的交迭积分的讨论，我们可以应用我们求得的严格的本征解 $\Phi_{0,N_0}(x)$，$\Phi_{d,N_0}(x)$ 代替文献[26]的高斯近似解 ϕ_0，ϕ_*，这里 $\Phi_{0,N_0}(x)$，$\Phi_{d,N_0}(x)$ 都是归一化的本征函数，即单

粒子波函数，N_0 粒子波函数应是单粒子波函数之积，交迭积分 I 可写为

$$I(N_0)=\left(\int x^2\,\mathrm{d}x\Phi_{d,N_0}(x)\Phi_{0,N_0}(x)\right)^{N_0} \tag{5-34}$$

$I(N_0)$ 的计算结果如图 5-12 中的虚线所示，它在临界点附近有较大的值，而远离临界点它很快地变为零. 这提示出在临界点附近的亚稳凝聚态可以很容易通过一个集体交换作用而跃迁到稠密态，进而出现崩塌. 事实上在临界点附近的两种态它们几乎有完全相同的化学势和空间分布，但它们的稳定特性是完全相反的. 然而，在远离临界点时，它们的化学势和空间分布相差甚远，这种跃迁是很困难的.

5.10 小 结

我们求得了一维箱势中具有吸引相互作用的中性原子体系的能级与波函数的解析解，分析了吸引相互作用对原子体系的能级和波函数的影响，并与排斥相互作用的中性原子体系的结果进行了比较，相对于无相互作用体系的能级，排斥体系的能级升高了，原子分布趋于分散；吸引体系的能级降低了，原子分布趋于集中. 由三维球方势和简谐势阱中具有吸引相互作用原子体系 NLSE 的本征解的数值解，得到类似的特性，即原子的空间分布随相互作用的增强而被连续压缩，得到凝聚原子数随能量本征值变化的双稳态曲线，并由此得到与实验报道相符的吸引玻色-爱因斯坦凝聚所能包含的最大原子数 N_c. 本征态解表明：对于 $N<N_c$ 具有吸引相互作用的原子体系的 BEC 可以形成. 对每一个 $N<N_c$ 存在一个亚稳凝聚态和相应同一原子数的不稳的稠密态. 在临界点附近亚稳凝聚可以很容易通过宏观

量子隧道而进入塌缩态；然而，远离临界点时，凝聚体应是相当稳定的．而这种崩塌的动力学还没有详细的理论描写，因为密度会变得大得足以要考虑多体相互作用．然而，当保持低的密度时，凝聚体的演化可以由一个准粒子在一个有效势场中的运动来描写．对于$T>0$的捕陷气体，崩塌之后仅初始不在凝聚体中的那些原子被保留，所以这时的气体处于非平衡分布．弹性碰撞重新热化气体，凝聚原子数继续增加．如果气体是被有效冷却的，那么凝聚将被继续填充和崩塌，直到达到$T=0$或没有原子被保留．这就是文献[100]提出的在蒸发冷却过程中凝聚原子数的生长和崩塌的演化模型．但这个模型还没有被证实．凝聚原子数的涨落已经被观察到，但还不清楚它是内在的还是由于捕陷装入和蒸发冷却的变化引起的．如果这些变化可以控制，N_0可以准确测量，涨落的测量可为凝聚生长和崩塌的动力学提供更详细的信息．它也将为多体量子理论提供更重要的依据．

第六章　BEC形成的动力学

6.1 引 言

当温度降得很低时，由玻色原子气体凝成玻色凝聚体的过程，可理解为一个个玻色原子由气态跃迁到凝聚态. 设凝聚体中包含n个原子，其基态为$|n>$，当一个气态原子增加到凝聚体$|n>$并使凝聚体推进到状态$|n+1>$的几率会由状态$|n>$中所含的原子数n而得到增强. 这与光学激光器中的增益机制类似，存在于某光场模式中的光子数n将会激发更多的光子向同一模式辐射，亦即受激辐射. 对于玻色原子情形，这种受激过程便是导致物质波的放大，即原子激光(Atom laser)获得增益. 这就是1997~1998 年 MIT 年所进行的原子激光实验[39]. 与此相应，Gardiner 发表了一系列的理论研究[38,101,102]，他们得出描述凝聚体密度矩阵ρ 的主方程，并进一步简化得出原子激光的变率方程. 解变率方程便得出凝聚体原子数n 随时间 t 的演化曲线，但未能求得n的统计起伏. 本文在阐述凝聚体主方程的物理意义的基础上，用解微激光主方程的母函数法[103,104]求得主方程的解析解[105]，进一步计算出凝聚体原子数$<n>$，增率$\frac{\mathrm{d}\ln n}{\mathrm{d}t}$随时间的演化，以及凝聚体原子数的统计起伏$<(\Delta n)^2>$等. 主要结果是增率在发展过程中有一个平台，而统计起伏为超 Poisson 分布.

6.2 BEC的动力学模型

6.2.1 凝聚带与非凝聚带

当势阱中有强的凝聚时，阱的最低能级将演化为宏观占据数，并修改阱中的其他能级. 如果阱是紧束缚的，较低的能级的分离应是合理的. 但紧束缚的概念不是绝对的，对低能级为紧束缚势，而对较高能级却是十分宽松的. 其本质区别是态密度，简谐势阱中的能态密度随能量的二次方而增加，因此对于某个适当的能量值，它已有非常稠密的能级. 因此可以认为凝聚效应对系统能级的修正仅对较低能级才是明显的. 将粒子状态分成凝聚带 R_C 和非凝聚带 R_{NC}，场算符写为 $\psi(\boldsymbol{r})=\phi(\boldsymbol{r})+\psi_{NC}(\boldsymbol{r})$. 两个带的划分是借助某个能量 E_R，选择这个能量使非凝聚带中所有粒子的能量都足够大，以致于最低能级上的凝聚体的存在对它们的能量没有明显的影响. 因为凝聚原子是分布在很窄的空间区域上. 图 6-1 为简谐势阱

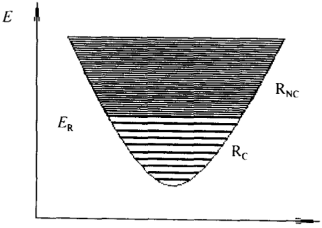


图 6-1　凝聚带和非凝聚带示意图

中两带的示意图．这样我们用分离能级来描写 $E<E_R$ 的凝聚带 R_C，显然它不仅包括凝聚在其中形成的基态，也包括受凝聚体存在较大影响的那些能级．而非凝聚带 R_{NC} 中的原子作为热原子，代表作为热库的大多数原子，它为凝聚生长提供了粒子源，由通常的平衡公式来描写．

6.2.2 凝聚体粒子数守恒的 Bogoliubov 近似

凝聚带 R_C 中的行为用全量子力学处理，势阱的能级因凝聚体的存在而被修改．在任意时刻 R_C 中有一个给定的原子数，在这种情况下的能级由粒子数守恒的 Bogoliubov 方法描写[106]．因此，R_C 中的态完全由 R_C 中的原子数和 R_C 内准粒子的量子态来描写．可将凝聚带的场算符写为

$$\phi(\boldsymbol{r})=B\left(\xi_N(\boldsymbol{r})+\sum_m\frac{b_m f_m(\boldsymbol{r})+b_m^{+}g_m(\boldsymbol{r})}{\sqrt{N}}\right) \tag{6-1}$$

能量为 ε_N^m 的准粒子由消灭算符 b_m 描写，而 B^{+} 是产生算符，对于任意的 N，它使系统的 R_C 由 N 原子基态进入 $N+1$ 基态．$\xi_N(\boldsymbol{r})$ 代表凝聚体波函数，它满足定态的 Gross-Pitaevskii 方程．$f_m(\boldsymbol{r})$ 和 $g_m(\boldsymbol{r})$ 是能量为 ε_N^m 的准粒子的产生和湮灭的振幅．在粒子数守恒的 Bogoliubov 方法中，原子数是守恒的，而准粒子是声子态的混合，这些声子与从激发的量子态到凝聚体能级转移一个原子的过程有关．这样，算符 b_m，b_m^{+} 不改变总粒子数，而算符 B 使它作用的每一项的总粒子数减少 1．要描写的过程如下：
① R_{NC} 中一些碰撞会转移一个原子到 R_C，使 $N\to N+1$，当然也有相反的过程，即非凝聚带的原子与凝聚带内的原子碰撞使一个原子从凝聚带到非凝聚带，使 $N\to N-1$．②考虑最初没有凝聚的情况时，R_C 和 R_{NC} 的边界被固定在一个凝聚体最终形成后

的适当值. ③随着蒸发冷却的进行，R_{NC}中的化学势变为非负的，这是允许的，只要化学势不超过R_{NC}的最低能量. ④对于弱相互作用势u，Bogoliubov 谱和波函数对所有的N（大的或小的）都是有效的，因为对于小的N和u，这里的结果与微扰理论并没有大的不同.

通过极限过程定义宏观波函数$<N,m,t|\phi^*(\boldsymbol{r})|N-1,m,t> \sim \sqrt{N}\xi^*(\boldsymbol{r},t)$[90] 的意义在于"由于凝聚体包含的粒子数是宏观数量的，改变数 1 基本上不影响系统的态，因此可以说凝聚体中增加（移去）一个粒子的结果是转换N粒子系统的态到$N+1$系统的'相同的'态，符号$|n,m,t>$和$|N+1,m,t>$表示两个'相同的'态仅有系统中的粒子数相差 1 的不同". 但如果考虑凝聚的生长，这种差别会有不可忽略的影响.

6.2.3 主方程的导出

应用量子动力学理论[102]可以描写凝聚体状态的密度算符的主方程. 一个原子散射进入、离开R_C的主要过程有如下六种情况，即没有准粒子数的改变，产生一个准粒子和吸收一个准粒子条件下的$N \to N\pm1$. 图 6-2 是可能跃迁的示意图.

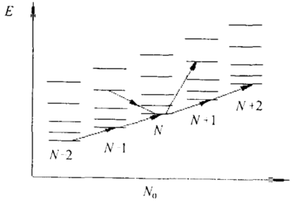


图 6-2　借助准粒子的跃迁示意图

这六种跃迁几率可借助函数 $R^{\pm}$ 表示为

$$W^{+}(N) = R^{+}(\xi_N, \mu_N / \hbar) \tag{6-2}$$

$$W^{-}(N) = R^{-}(\xi_{N-1}, \mu_{N-1} / \hbar) \tag{6-3}$$

$$W_m^{++}(N) = R^{+}(f_m, (\varepsilon_N^m + \mu_N) / \hbar) \tag{6-4}$$

$$W_m^{--}(N) = R^{-}(f_m, (\varepsilon_{N-1}^m + \mu_{N-1}) / \hbar) \tag{6-5}$$

$$W_m^{+-}(N) = R^{+}(g_m, (-\varepsilon_N^m + \mu_N) / \hbar) \tag{6-6}$$

$$W_m^{-+}(N) = R^{-}(g_m, (-\varepsilon_{N-1}^m + \mu_{N-}) / \hbar) \tag{6-7}$$

函数 $R^{\pm}$ 被定义为

$$R^{+}(y,\omega) = \frac{u^2}{(2\pi)^5 \hbar^2} \int d^3 r \int d\Gamma \Delta(\Gamma,\omega) F_1 F_2 (1+F_3) W_y(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}) \tag{6-8}$$

$$R^{-}(y,\omega) = \frac{u^2}{(2\pi)^5 \hbar^2} \int d^3 r \int d\Gamma \Delta(\Gamma,\omega)(1+F_1)(1+F_2) F_3 W_y(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}) \tag{6-9}$$

式中

$$d\Gamma = d^3k_1 d^3k_2 d^3k_3 d^3k \ ,$$

$$\Delta(\Gamma,\omega) = \delta[\Delta\omega_{123}(\boldsymbol{r})]\delta(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3 - \boldsymbol{k}) \ ,$$

以及

$$W_y(\boldsymbol{r},k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 v y^*(\boldsymbol{r} + \frac{v}{2}) y^*(\boldsymbol{r} - \frac{v}{2}) e^{ik\cdot v} \tag{6-10}$$

表示相应于波函数 $y(\boldsymbol{r})$ 的 Wigner 函数. $F_i \equiv F(\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{r})$ 是相体积 h^3 中非凝聚原子密度.

$$\Delta\omega_{123}(\boldsymbol{r}) = \omega_{k_1}(\boldsymbol{r}) + \omega_{k_2}(\boldsymbol{r}) - \omega_{k_3}(\boldsymbol{r}) \tag{6-11}$$

$$\hbar\omega_k(\boldsymbol{r})=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V_{\text{ext}}(\boldsymbol{r}) \tag{6-12}$$

我们可以写出占有数几率 $p(N,\boldsymbol{n})$ 的随机主方程，$\boldsymbol{n}=\{n_m\}$ 是所有准粒子占有数集（矢量）.

$$\begin{aligned}\dot{p}(N,\boldsymbol{n})=&\,2NW^+(N-1)p(N-1,\boldsymbol{n})-2(N+1)W^+(N)p(N,\boldsymbol{n})+\\&2(N+1)W^-(N+1)p(N+1,\boldsymbol{n})-2NW^-(N)p(N,\boldsymbol{n})+\\&\sum_m\Big[2n_mW_m^{++}(N-1)p(N-1,\boldsymbol{n}-\boldsymbol{e}_m)-2(n_m+1)W_m^{++}(N)p(N,\boldsymbol{n})\Big]+\\&\sum_m\Big[2(n_m+1)W_m^{--}(N+1)p(N+1,\boldsymbol{n}+\boldsymbol{e}_m)-2n_mW_m^{--}(N)p(N,\boldsymbol{n})\Big]+\\&\sum_m\Big[2(n_m+1)W_m^{+-}(N-1)p(N-1,\boldsymbol{n}+\boldsymbol{e}_m)-2n_mW_m^{+-}(N)p(N,\boldsymbol{n})\Big]+\\&\sum_m\Big[2n_mW_m^{-+}(N+1)p(N+1,\boldsymbol{n}-\boldsymbol{e}_m)-2(n_m+1)W_m^{-+}(N)p(N,\boldsymbol{n})\Big]\end{aligned} \tag{6-13}$$

其中 $\boldsymbol{e}_m=\{\cdots,0,0,1,0,0,\cdots\}$ 仅在相应的脚标 m 处有不为零的值. 函数 $R^{\pm}(y,\omega)$ 为向前和向后碰撞速率，这些碰撞使粒子进入(+)或离开(-)具有能量 $\hbar\omega$ 的凝聚体. 碰撞一定发生在凝聚体的 Wigner 函数不为零的位置. (6-13)式中表示跃迁到凝聚体基态的几率的项，展示出按近似 N 的碰撞速率而受激增加，这个数 N 可达10^7，但仅乘以 n_m 的跃迁几率并不大. 这样，作为初步近似，我们可以丢掉准粒子项(它约为碰撞项的 $1/N$)，这样可略去相应的大多数凝聚过程. 注意到与相空间的分布函数 $F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$ 比较，凝聚波函数在 $\boldsymbol{r}=0$ 有尖锐的峰，除了 $W_{\xi_N}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k})$，我们可以在大多数计算中用零代替 $\boldsymbol{r}$，它的积分给出 $\boldsymbol{k}$ 空间的凝聚体的几率密度 $|\tilde{\xi}_N(\boldsymbol{k})|^2$. 最后可得到简化的主方程

$$\dot{p}(N) = 2NW^{+}(N-1)p(N-1) - 2(N+1)W^{+}(N)p(N) + 2(N+1)W^{-}(N+1)p(N+1) - 2NW^{-}(N)p(N) \qquad (6\text{-}14)$$

6.2.4 涨落与增率方程

凝聚密度算符的定态解是具有不同粒子数的态的混合(不是量子力学纯态)，对每一个态，凝聚体的波函数 $\xi_N(\boldsymbol{r})$ 即是与时间无关的 N 粒子 Gross-Pitaevskii 方程的解. 略去各种涨落，可求得平均粒子数的速率方程为[102]

$$\dot{N} = 2W^{+}(N)\{(1-e^{[\mu-\mu(N)/k_BT]})N+1\} \qquad (6\text{-}15)$$

μ 是蒸气的化学势，由统计力学决定；$\mu(N)$ 为 N 粒子凝聚波函数的化学势，可由 N 粒子定态 Gross-Pitaevskii 方程求得. 当二者相等时，即凝聚带 R_C 和非凝聚带 R_{NC} 的温度相等时达到平衡，系统达到稳态.

6.3 占有数 p 满足的主方程

为了对粒子数表象中占有数 p 所满足的主方程(6-14)式进行解析求解，作如下近似处理

$$W^{+}(n-1) \approx W^{+}(n) \approx W^{+}(<n>),$$
$$W^{-}(n-1) \approx W^{-}(n) \approx W^{-}(<n>), \qquad (6\text{-}16)$$

并令 $A = 2W^{+}(<n>)$，$B = 2W^{-}(<n>)$，则(6-14)式可写为

$$\dot{p}(n) = A(np(n-1) - (n+1)p(n)) + B[(n+1)p(n+1) - np(n)]. \qquad (6\text{-}17)$$

用凝聚体湮没与产生算子 b, b^{+} 来表示（6-17）可写为

$$\dot{p} = A[2b^+ pb - pbb^+ - bb^+ p] + B[2bpb^+ - pb^+ b - b^+ bp]. \tag{6-18}$$

(6-18)式是我们熟知的激光与热库相互作用方程，A, B 由激光场与热库之间交换光子的机制而定. 现在是原子激光，(6-18)式第一项表示的物理过程为，气态原子 1，2 相碰撞并转化为气态原子 3 及凝聚态原子 4，转化率为 $W^+ \propto \phi_{1n}^+\phi_{1n}\phi_{2n}^+\phi_{2n}\phi_{3n}\phi_{3n}^+\phi_{4c}\phi_{4c}^+$，经仔细计算得[102]

$$W^+ = \frac{u^2}{(2\pi)^5\hbar^2}\int d^3\boldsymbol{k}_1\int d^3\boldsymbol{k}_2\int d^3\boldsymbol{k}_3\int d^3\boldsymbol{k}_4\delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4)$$
$$\delta(\Delta\omega_{123}-\mu(n)/\hbar)F(\boldsymbol{k}_1,0)F(\boldsymbol{k}_2,0)[1+F(\boldsymbol{k}_3,0)]\left|\bar{\xi}_n(\boldsymbol{k})\right|^2, \tag{6-19}$$

式中 $\bar{\xi}_n = \frac{1}{2\pi^{3/2}}\int d^3\boldsymbol{x}\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,\xi_n(\boldsymbol{x})$ 为动量空间凝聚体波函数. 同样第二项表示逆过程，凝聚原子 4 与气态原子 3 相碰转化为气态原子 1 与 2 的转化率 $W^- \propto \phi_{1n}\phi_{1n}^+\phi_{2n}\phi_{2n}^+\phi_{3n}^+\phi_{3n}\phi_{4c}^+\phi_{4c}$，即

$$W^- = \frac{u^2}{(2\pi)^5\hbar^2}\int d^3k_1\int d^3k_2\int d^3k_3\int d^3k_4\delta(k_1+k_2-k_3-k_4)\times$$
$$\delta(\Delta\omega_{123}-\mu(n)/\hbar)(1+F(k_1,0))(1+F(k_2,0))F(k_3,0)\left|\bar{\xi}_n(k)\right|^2. \tag{6-20}$$

6.4 主方程的解

参照文献[103,104]解微激光主方程的方法，首先定义母函数

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \rho(n). \tag{6-21}$$

于是有

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} n\, z^n \rho(n-1) &= z(z\frac{\partial}{\partial z} + 1)\, G(z), \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)\, z^n \rho(n) &= (z\frac{\partial}{\partial z} + 1)\, G(z), \\ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)\, z^n \rho(n+1) &= \frac{\partial}{\partial z} G(z). \end{aligned} \tag{6-22}$$

用 $\sum_{n=0}^{\infty} z^n$ 作用于主方程(6-17)，并由(6-21)，(6-22)便得 $G(z)$ 所满足的方程

$$(\frac{\partial}{\partial t} + (A(1-z)z + B(z-1))\frac{\partial}{\partial z})G(z) = A(z-1)\, G(z) \tag{6-23}$$

定义

$$z_0 = \frac{(z-1)B\,e^{-ct} + B - Az}{B - Az + (z-1)A\,e^{-ct}}, \quad c = B - A \tag{6-24}$$

易证

i. $(\frac{\partial}{\partial t} + (z-1)(B-Az)\frac{\partial}{\partial z})z_0 = 0$

ii. $z_0\big|_{t\to 0} = z$

iii. $\frac{\partial z_0}{\partial t} = \frac{(B-A)^2\, e^{-ct}}{(B - Az + (z-1)A\,e^{-ct})^2}$

$$\left.\frac{\partial z_0}{\partial z}\right|_{t\to 0} = 1, \quad \left.\frac{\partial z_0}{\partial z}\right|_{z=1} = e^{ct}$$

iv. $$\frac{\partial^2 z_0}{\partial z^2}=\frac{2A(B-A)^2\,\mathrm{e}^{ct}(1-\mathrm{e}^{ct})}{(B-Az+(z-1)A\,\mathrm{e}^{ct})^3}$$

$$\left.\frac{\partial^2 z_0}{\partial z^2}\right|_{t\to 0}=0,\quad \left.\frac{\partial^2 z_0}{\partial z^2}\right|_{z=1}=\frac{2A}{B-A}\mathrm{e}^{-ct}(1-\mathrm{e}^{-ct}) \tag{6-25}$$

满足(6-23)式的 $G(z)$ 通解为

$$G(z)=G_0(z_0)\exp[\int_{z_0}^{z}\frac{A}{B-Az}\,\mathrm{d}\,z],\quad G_0(1)=1 \tag{6-26}$$

事实上将(6-26)式代入(6-23)式得

$$\begin{aligned}&(\frac{\partial}{\partial t}+(A(1-z)z+B(z-1))\frac{\partial}{\partial z})G=\\&(A(1-z)z+B(z-1))\frac{A}{B-Az}G=A(z-1)\,G\end{aligned} \tag{6-27}$$

于是可由(6-26)及(6-25)求得

$$\begin{aligned}<n>=\left.\frac{\partial G}{\partial z}\right|_{z=1}&=[\frac{\partial G_0}{\partial z_0}\frac{\partial z_0}{\partial z}+G_0\frac{A}{B-Az}(1-\frac{\partial z_0}{\partial z})]_{z=1}=\\&<n>_0\,\mathrm{e}^{-ct}+\frac{A}{B-A}(1-\mathrm{e}^{-ct})\end{aligned} \tag{6-28}$$

$$\begin{aligned}<(\Delta n)^2>=<n^2>-<n>^2=<n(n-1)>+<n>-<n>^2=\\\left.\frac{\partial^2 G}{\partial z^2}\right|_{z=1}+<n>-<n>^2\end{aligned} \tag{6-29}$$

式中

$$\left.\frac{\partial^2 G_0}{\partial z_0^2}\right|_{z=1} = < n(n-1) >_0 , \quad \left.\frac{\partial G_0}{\partial z_0}\right|_{z=1} = < n >_0$$

$$\left.\frac{\partial^2 G}{\partial z^2}\right|_{z=1} = \left[\frac{\partial^2 G_0}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} G_0 + \frac{\partial H}{\partial z}\frac{\partial G_0}{\partial z} + \left(\frac{\partial G_0}{\partial z} + \frac{\partial H}{\partial z} G_0\right)\frac{\partial H}{\partial z}\right] \left. e^H \right|_{z=1}$$

$$H = \int_{z_0}^{z} \frac{A}{B - Az} \mathrm{d} z$$

$$\left.\frac{\partial^2 G_0}{\partial z^2}\right|_{z=1} = \left.\left[\frac{\partial^2 G_0}{\partial z_0^2}\left(\frac{\partial z_0}{\partial z}\right)^2 + \frac{\partial G_0}{\partial z_0}\frac{\partial^2 z_0}{\partial z^2}\right]\right|_{z=1} =$$

$$< n(n-1) >_0 \mathrm{e}^{-2ct} + < n >_0 \mathrm{e}^{-ct} \frac{2A}{B-A}(1 - \mathrm{e}^{-ct})$$

$$\left.\frac{\partial H}{\partial z}\frac{\partial G_0}{\partial z}\right|_{z=1} = \left.\frac{\partial H}{\partial z}\frac{\partial G_0}{\partial z_0}\frac{\partial z_0}{\partial z}\right|_{z=1} =$$

$$< n >_0 \mathrm{e}^{-ct} \frac{A}{B-A}(1 - \mathrm{e}^{-ct})$$

$$\left.\left(\frac{\partial G_0}{\partial z} + \frac{\partial H}{\partial z} G_0\right)\frac{\partial H}{\partial z}\right|_{z=1} =$$

$$\left(< n >_0 \mathrm{e}^{-ct} + \frac{A}{B-A}(1 - \mathrm{e}^{-ct})\right)\frac{A}{B-A}(1 - \mathrm{e}^{-ct})$$

$$\left.\frac{\partial^2 H}{\partial z^2}\right|_{z=1} = \left.\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{A}{B-Az} - \frac{A}{B-Az_0}\frac{\partial z_0}{\partial z}\right)\right|_{z=1} = \frac{A^2}{(B-A)^2}(1-\mathrm{e}^{-ct})^2 \tag{6-30}$$

由(6-28)~(6-30)最后得

$$<(\Delta n)^2>=<(\Delta n)^2>_0 \mathrm{e}^{-2ct} + \frac{A+B}{B-A}\mathrm{e}^{-ct}(1-\mathrm{e}^{-ct})<n>_0 + \frac{A}{B-A}(1-\mathrm{e}^{-ct}) + \frac{A^2}{(B-A)^2}(1-\mathrm{e}^{-ct})^2 \tag{6-31}$$

考虑到 A, B 均是 $<n>$ 的函数，故(6-28), (6-31)提供了一个计算 $<n>$， $<(\Delta n)^2>$ 的迭代式. 即将时间间隔 $(0, t)$ 分成若干个小间隔，每一间隔 Δt 内 $<n>$ 及 $<(\Delta n)^2>$ 的变化可参照(6-28),(6-31)式写为

$$<n>_{k+1}=<n>_k \mathrm{e}^{-c_k\Delta t} + \frac{A_k}{B_k - A_k}(1-\mathrm{e}^{-c_k\Delta t})$$

$$<(\Delta n)^2>_{k+1}= <(\Delta n)^2>_k \mathrm{e}^{-2c_k\Delta t} + \frac{A_k+B_k}{B_k-A_k}e^{-c_k\Delta t}(1-\mathrm{e}^{-c_k\Delta t})<n> + \frac{A_k}{B_k-A_k}(1-\mathrm{e}^{-c_k\Delta t}) + \frac{A_k^2}{(B_k-A_k)^2}(1-\mathrm{e}^{-c_k\Delta t})^2$$

(6-32)

$$A_{k+1}=A(<n>_{k+1}),\qquad B_{k+1}=B(<n>_{k+1}).$$

考虑到 $c_k=B_k-A_k<0$，(6-32)式表明在 Δt 时间内，初始值 $<n>$ 及 $<(\Delta n)^2>_k$ 分别以 $e^{-c_k\Delta t}$ 和 $e^{-2c_k\Delta t}$ 进行放大. 在研究原子统计分布性质时，可通过下面的定义将此放大因子去掉，即定义约化的 $<\tilde{n}>_k$ 及 $<(\Delta\tilde{n})^2>_k$ 为

$$<\tilde{n}>_k=<n>_k\ /\ e^{-\sum_{l=1}^{k}c_l\Delta t}$$

$$<(\Delta\tilde{n})^2>_k=<(\Delta n)^2>_k\ /\ e^{-2\sum_{j=1}^{k}c_j\Delta t}\tag{6-33}$$

定义如下因子 Q_k 来表征原子分布的统计起伏:

$$Q_k=<(\Delta\tilde{n})^2>_k\ /\ <\tilde{n}>_k\tag{6-34}$$

6.5 凝聚体原子数的增益与统计起伏的计算

在上节求解的基础上，并参照文献[38,102]得

$$A=2W^{+}=\frac{8m(\bar{a}kT)^2}{\pi\hbar^3}e^{2\mu(n_{eq})/kT}\left\{\frac{\mu(n)}{kT}K_1(\frac{\mu(n)}{kT})\right\}\tag{6-35}$$

$$B/A=W^{-}/W^{+}=\exp\{(\mu(n)-\mu(n_{eq}))/kT\}$$

式中 n 为凝聚体原子数，n_{eq} 为气体与凝聚体达到平衡时凝聚体原子数. 式中的因子 $\frac{8m(\bar{a}kT)^2}{\pi\hbar^3}=\frac{4\omega}{\pi}\left(\frac{\bar{a}}{\alpha}\right)^2\sigma^{-2}$，$\alpha=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$，$\sigma=\frac{\hbar\omega}{kT}$， 对于钠原子[2]，$m=3.84\times10^{-26}\,\text{kg}$，$\omega=2\pi\times415\ \text{s}^{-1}$，$\bar{a}=4.9\,\text{nm}$，可算得 $\alpha=1.817\times10^{-6}\,\text{m}$. 在此参数条件下，根据我

们的数值计算(4.17)式，化学势 μ 与凝聚体粒子数 n 的关系可近似表示为 $\mu(n)=0.124(n+511)^{2/5}$. 于是通过解方程(6-31)和(6-32)可求得当温度 $T=2\ \mu\text{K}$, $n_{eq}=5\times10^5$ 情形，凝聚体粒子数 $<n>$ 及增率 $\gamma=\dfrac{\mathrm{d}\ln<n>}{\mathrm{d}t}$ 随时间的演化，所计算的结果画在图 6-3 和 6-4 中. 图 6-3 中凝聚原子数随时间的演化曲线与增率方程(6-15)求得的结果是一致的. 由图 6-4 看出，在 BEC 形成的初始阶段增率很大，中间有一平台，到末了增率又下降到零. 这平台的增率即可代表凝聚体的增率，图 6-5 给出起伏 Q 随时间的变化，由初始 Poisson 分布 $Q=1$ 急剧升到超 Poisson 平台 $Q=1.33$. 当改变 n_{eq} 时，凝聚粒子数，增率及统计起伏随时间的演化也有类似于图 6-3～图 6-5 的变化曲线.

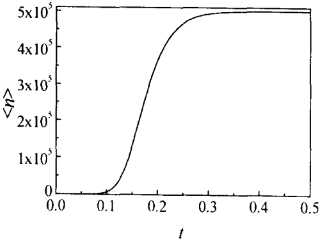


图 6-3 凝聚体粒子数 n 随时间 t 的演化

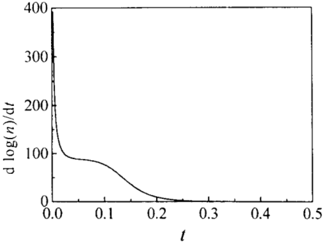


图 6-4　增率 γ 随时间 t 的演化

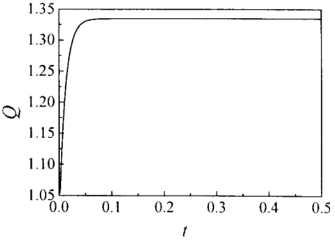


图 6-5　起伏 Q 随时间 t 的变化

6.6 凝聚增率与平衡原子数的关系

值得一提的是在导出(6-35)式时假定 n_{eq} 个原子是自由的相互作用，并未考虑到碰撞的受阻，亦即假定自由程是无限大的. 若考虑到自由程有限，粒子间的相互作用实际上只能在自由程线度内有效进行，故 GP 方程中对硬球模型散射有贡献的粒子并非 n_{eq} 的全部，而只是靠得很近的部分粒子 $\widetilde{n}_{eq}$，设自由程为 l，则

$$\widetilde{n}_{eq}=n_{eq}\frac{\int_0^R r^2 e^{-r/l}dr}{\int_0^R r^2\,dr}= n_\lambda\left(1-(1+R/l+\frac{1}{2}(R/l)^2)e^{-R/l}\right) \tag{6-36}$$

$$n_\lambda=6l^3\frac{n_{eq}}{R^3},\quad R/l=\left(6n_{eq}/n_\lambda\right)^{1/3}.$$

故给定 n_λ，n_{eq} 后便可算出有效的 $\widetilde{n}_{eq}$. 用 $\widetilde{n}_{eq}$ 代替(6-35)式中的 n_{eq}，便可算出修正后的 A 与 $\frac{B}{A}$. 参照文献[81]，平均自由程 $l=\frac{1}{\sqrt{2}\pi nd^2}$，假定原子密度为 $n=\frac{n_{eq}}{(4/3)\pi R^3}=10^{15}$，原子直径 $d=4.9\,\text{nm}$，那么 $n_\lambda=8\pi l^3 n\approx 3\times10^5$. 根据文献[39]的实验数据，我们假定相应不同 n_{eq} 的平衡温度 T 有如图 6-6 所示的关系，对于不同 n_{eq} 所计算的增率如图 6-7 中曲线所示，γ 随 n_{eq} 的变化关系与实验结果[39]大体上是一致的.

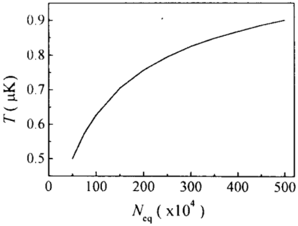


图 6-6　BEC 形成的最终温度 T 与平衡时凝聚中的原子数 n_{eq} 之间的关系

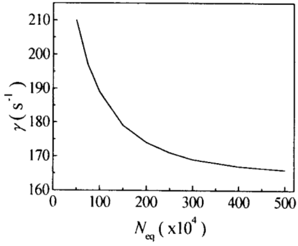


图 6-7　凝聚生长速率 γ 与平衡时凝聚中的原子数 n_{eq} 之间的关系

6.7 小结

本章给出了描写 BEC 的动力学模型和主方程，用母函数法求得玻色凝聚体主方程的解，并计算了凝聚体形成的增率与起伏，增率曲线存在一平台，而平台的粒子起伏则是超 Poisson 分布的. 初始增率γ随最终平衡原子数n_{eq}的增加而逐步减小，与实验结果大体上一致.

第七章　BEC自发与受激跃迁几率的增强

7.1 引 言

激光冷却和势阱中原子玻色-爱因斯坦凝聚实验的快速进展促进了这一现象的研究. 已经有很多文章讨论有关多玻色子处于同一量子态的凝聚体的光学性质[44,53,54,107]. 例如为了通过冷却的原子系统的光散射进行BEC探测，几个作者在最近几年考虑了这个问题[44,107]. 他们讨论了在低温$T\approx 0$和空间均匀系统的凝聚体的弱光散射. 这样一种情况物理上相应于无限大势阱极限. 这个理论已被扩展到有限大小势阱中原子的情形. Javanainen考虑了具有跃迁波长λ的量级大小为a的光学薄凝聚体[108]. 在他给出的这个框架内，散射主要发生在向前方向，散射截面有一个罗仑兹线型，其宽度比例于集体自发辐射（超辐射）速率. 最近的文章[47]指出上面的结论在有限尺度a在$(1\sim 20)\lambda$的范围内的光学厚势阱中应被修正. 在适度的原子密度n以致使$n(\lambda/2\pi)^3\approx 1\sim 10$，人们并观察不到背散射，传播效应以某种方式影响散射过程，参考文献[108]的方法变得不适用，谱变成非罗仑兹型并在共振处展示出一个窄峰. 在文献[47]中You等研究了来自势阱中冷玻色原子系统的弱光相干散射，他们推导并详细讨论了描写来自不同原子的多次散射过程的散射方程. 他们提出

这个方程的两种解析求解方法，一个是根据 on-shell 近似的散射方法[109]，另一个是根据 Glauber 的广义衍射[110]．他们计算了散射截面，角分布和谱分布．有必要强调的是他们之所以能求得散射方程的解析解主要因为他们应用了以下假定：①自能核 K 中的 $\rho(k)\rho(k')$ 由 $|\rho(k)|^2$ 代替．② 忽略了偏振积 $\vec{\varepsilon}_{k\mu}\cdot\vec{\varepsilon}_{k'\mu'}$ 的依赖关系[48]．后来，讨论了激发态原子穿过凝聚体时所产生的自发辐射[53]．他们将总的辐射速率 γ_{tot} 表示为自发和受激而进入基态的辐射速率之和 $\gamma_{\text{tot}}=\gamma+\gamma Nf$，这里 N 是 BEC 中的原子数，比例系数 f 与基态的 Frank-Condon 因子有关，它可在假定基态和激发态分别为大小为 l_1 和 l_2 的高斯波函数而求得．最近，Hu Huang 等[54] 应用类似的处理计算了 Frank-Condon 因子，最后得到了在 BEC 中吸收共振的 Lamb 移位的修正 δ 比例于 $N/k_{eg}x_0$，x_0 是高斯分布的大小．本章中我们考虑在低温下和弱光相互作用的可准确求解的 N 原子辐射模型体系．我们导出自发和受激辐射速率的一般的严格公式[111]，但不用文献[109]中自能核的计算中使用的 on-shell 近似和两个假定．从这个公式我们得到辐射速率的增强与两个因素有关．一是原子的密度分布，另一个则是德布罗意波长 λ_{B}．实际上，所求得的自发与受激辐射增强因子正比于体积 $\lambda^3/(2\pi^2)$（λ 是原子的跃迁波长）中原子数 n，并以一种复杂的函数关系依赖于德布罗意波长 λ_{B}．总之，当 λ_{B} 与原子的跃迁波长 λ 之比 $\xi_{\text{B}}=\sqrt{2\pi}\,\lambda_{\text{B}}/\lambda=\hbar k_L/\sqrt{mkT}=2.45$ 时，辐射速率的增强达到它的极大值，当 $kT\to 0$、$\xi_{\text{B}}\to\infty$ 时，趋于零．另一方面，Lamb 移位的修正，当 $\xi\to 0$ 时，趋于零，当 $\xi\to\infty$ 时，趋于一个有限值．后者在

BEC 形成实验的诊断中是有用的[112]. 很明显，我们所得到的结果非常不同于由作者 You, Hope and Hu Huang 所得到的结果. 解决问题的关键在于我们严格的解析解考虑了原子的热运动，也没有上面提到的近似和假定.

7.2 单原子辐射的线宽与能级移位

初始处于激发态的原子自发辐射回到基态，由于辐射场对原子的反作用，会使得原子辐射有一定的线宽且有能级移位. 这从原子波函数随时间的变化可以看出来. 这就是 Wigner 与 Weisskopf 的自然线宽理论[113].

电磁场量子化给出电场 $\boldsymbol{E}$ 经量子化后按空间模式 $u_\lambda(\boldsymbol{r})$ 的展开式[12]

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) &= -\mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma}\sqrt{2\pi\hbar\omega_\lambda}\,(b_\lambda^+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}-b_\lambda^-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t})\bar{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}\mu_\lambda(\boldsymbol{r}) = \\ &\sum_{\lambda,\sigma}(\boldsymbol{E}_{\lambda,\sigma}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}-\boldsymbol{E}^*_{\lambda,\sigma}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t})\mu_\lambda(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{7-1}$$

式中 λ 为模式指标，$\bar{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}$ 为光的偏振，$\mu_\lambda(\boldsymbol{r})$ 为归一化的空间模式，若为平面波，则 $\mu_\lambda(\boldsymbol{r}) = L^{-3/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_\lambda\cdot\boldsymbol{r}}$，$L$ 为谐振腔的尺度，b_λ, b_λ^+ 分别为第 λ 模式的光子的湮灭与产生算符. 由上式给出的 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ 是一个算符展开，只有作用在态函数上才有意义. 例如作用在真空态 $|0_\lambda>$ 上，$b_\lambda|0_\lambda>=0, b_\lambda^+|0_\lambda>=|1_\lambda>$，故上式为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)|0>= \\ &\qquad \mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma}\sqrt{2\pi\hbar\omega_\lambda}\,(b_\lambda^+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}\quad b_\lambda\,\mathrm{e}^{\quad\mathrm{i}\omega_\lambda t})\bar{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}\mu_\lambda(\boldsymbol{r})|1_\lambda>\end{aligned} \tag{7-2}$$

于是原子与真空场的偶极相互作用矩阵元可写为[12]

$$< g, 1_\lambda \,|\, H' \,|\, e, 0_\lambda > =$$
$$\mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\lambda}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}\,u_\lambda(\boldsymbol{r})(-\mathrm{e}\,\omega_{eg}) < e \,|\, \boldsymbol{r} \,|\, g > \cdot \vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma} = \tag{7-3}$$
$$(-e)\,\mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\lambda}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}\,u_\lambda(\boldsymbol{r})\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}$$

这是一个激发态原子辐射出一个状态为"λ， $\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}$"的光子并向末态$|g>$跃迁的$H'$矩阵元. 参照弱场微扰理论我们求得原子的初始状态$|e,0>$及末态$|g,1_\lambda>$的模量$a_{e,0}(t)$， $a_{g,1_\lambda}(t)$随时间t的变率方程为

$$\frac{\mathrm{d}a_{e,0}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\sum_{g,1_\lambda,\sigma} < e,0 \,|\, H' \,|\, g,1_\lambda > \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{eg}t}\,a_{g,1_\lambda}(t) \tag{7-4}$$

$$\frac{\mathrm{d}a_{g,1_\lambda}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} < g,1_\lambda \,|\, H' \,|\, e,0 > \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{eg}t}\,a_{e,0}(t) \tag{7-5}$$

由此解出

$$a_{g,1_\lambda} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t < g,1_\lambda \,|\, H' \,|\, e,0 > \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{eg}t'}\,a_{e,0}(t')\,\mathrm{d}t' =$$
$$\frac{-e}{\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\lambda L^3}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_\lambda\cdot r}\,\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_{eg}-\omega_\lambda)t'}a_{e,0}(t')\,\mathrm{d}t' \tag{7-6}$$

$$\frac{\mathrm{d}a_{e,0}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{g,1_\lambda}\frac{2\pi\hbar e^2}{\omega_\lambda L^3}\left(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}\right)^2\int_0^t\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{eg}-\omega_\lambda)(t-t')}\,a_{e,0}(t')\,\mathrm{d}t' \tag{7-7}$$

对 $a_{e,0}(t)$ 作 Laplace 变换，并注意到 $a_{e,0}(0)=1$，可得

$$\widetilde{a}(s)=\left(s+\frac{\mathrm{i}}{\hbar^2}\sum\frac{2\pi\hbar e^2(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma})^2}{L^3\omega_\lambda(\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s)}\right)^{-1} \tag{7-8}$$

由 Laplace 反变换得出初态模量 $a_{e,0}(t)$

$$a_{e,0}(t)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty}\frac{\mathrm{e}^{st}\mathrm{d}s}{s+\frac{\mathrm{i}}{\hbar^2}\sum\frac{2\pi\hbar e^2(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma})^2}{L^3\omega_\lambda(\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s)}} \tag{7-9}$$

上面沿 s 复平面虚轴的路径积分，再补上左半平面无限大半圆(贡献可略去)，便是一包括左半平面的闭路积分，显然对积分作出贡献的即被积函数在左半平面的极点 $R_e(s)<0$，当 s 很小时

$$\frac{1}{\omega_{eg}-\omega_\lambda-\mathrm{i}s}=\frac{\omega_{eg}-\omega_\lambda}{(\omega_{eg}-\omega_\lambda)^2+s^2}-\frac{\mathrm{i}s}{(\omega_{eg}-\omega_\lambda)^2+s^2}\approx\frac{P}{\omega_{eg}-\omega_\lambda}-\mathrm{i}\pi\delta(\omega_{eg}-\omega_\lambda) \tag{7-10}$$

式中 P 为取主值，代入上式得

$$a_{e,0}(t)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\varepsilon-i\infty}^{\varepsilon+i\infty}\frac{\mathrm{e}^{st}\mathrm{d}s}{s+\frac{1}{2}\Gamma_e+\mathrm{i}\Delta\omega_\lambda}=\mathrm{e}^{-(\frac{1}{2}\Gamma_e+\mathrm{i}\Delta\omega_e)t} \tag{7-11}$$

式中

$$\Gamma_e=\frac{2\pi}{\hbar^2}\sum_{g,1_\lambda,\sigma}\frac{2\pi\hbar e^2(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma})^2}{L^3\omega_\lambda}\delta(\omega_{eg}-\omega_\lambda) \tag{7-12}$$

$$\Delta\omega_e = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{g,1_\lambda,\sigma}\frac{2\pi\hbar e^2(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma})^2}{L^3\omega_\lambda}\frac{P}{\omega_{eg}-\omega_\lambda} \tag{7-13}$$

7.3 N 原子的自发跃迁速率

将单原子的 Wigner-Weisskopf 自然线宽理论[113]

$$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s = \frac{\mathrm{i}}{\hbar^2}\sum_{\lambda,\sigma}\frac{\langle e,0|H'|g,1_\lambda\rangle\langle g,1_\lambda|H'|e,0\rangle}{\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s} =$$

$$\mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma}\frac{2\pi e^2(\vec{v}_{eg}\cdot\vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma})^2}{\hbar\omega_\lambda(\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s)} = \mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma}g^2_{\lambda,\sigma}\frac{1}{\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s} \tag{7-14}$$

推广到 N 原子情形，定态波函数 Ψ_n 取如下形式：

$$\Psi_n = \psi_{n1}\psi_{n2}\cdots\psi_{nN},$$

$$\psi_{n_i} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{ni}t/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}_{ni}\cdot\vec{r}/\hbar}\varphi_{n_i}(\vec{q}_i) \tag{7-15}$$

式中坐标 $\vec{q}_i,\vec{r}_i$，波函数 $\varphi_{n_i}(\vec{q}_i)$ 与 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{p}_{ni}t/\hbar}$ 分别是第 i 个原子的内部及质心坐标的波函数. 可以直接将(7-14)式中的 H' 代以 $\sum_{i=1}^{N}H'_i$，这样便得到：

$$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s = \frac{\mathrm{i}}{\hbar^2}\sum_{\lambda,\sigma}\sum_{i,j=1}^{N}\frac{\langle e,0|H_i'|g,1_\lambda\rangle\langle g,1_\lambda|H_j'|e,0\rangle}{\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s} \tag{7-16}$$

应用(7-14), (7-15)式便得出相互作用密度矩阵元为

$$< e,0 | H' | g,1_\lambda >= \hbar g^{*}_{\lambda,\sigma} r^{+}(\vec{r}_i)\, e^{i\omega_\lambda \quad i\vec{k}_\lambda \quad \vec{r}_i}$$

$$g^{*}_{\lambda,\sigma} = \quad i\, e\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\lambda L^3}}\, \vec{v}_{eg} \quad \vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}, \tag{7-17}$$

$$r^{+}(\vec{r}_i) = e^{\,i(\vec{p}_e \quad \vec{p}_g)\quad \vec{r}_i/\hbar}$$

$$< g,1_\lambda | H' | e,0 >= \hbar g_{\lambda,\sigma} r \quad (\vec{r}_j)\, e^{\,i\omega_\lambda t + i\vec{k}_\lambda \quad \vec{r}_j}$$

$$g_{\lambda,\sigma} = i\, e\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\lambda L^3}}\, \vec{v}_{ge} \quad \vec{\varepsilon}_{\lambda,\sigma}, \tag{7-18}$$

$$r \quad (\vec{r}_j) = e^{\,i(\vec{p}_e \quad \vec{p}_g)\quad \vec{r}_j/\hbar}$$

将(7-16)式写为

$$\frac{1}{2}\gamma + i\,\Delta\omega \quad = i\sum_{\lambda,\sigma} g^{2}_{\lambda,\sigma} \quad \sum_{i=1}^{N}\frac{< r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) >}{\omega_{eg} \quad \omega_\lambda + i s} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N}\frac{< r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_j) >}{\omega_{eg} \quad \omega_\lambda + i s}\, e^{\,i\vec{k}_\lambda \quad (\vec{r}_i \quad \vec{r}_j)} \tag{7-19}$$

注意到方括号中的第一项表示自作用，而第二项表示 N 原子之间的相互作用； r^{+}, r 分别是能级的“上”和“下”算符， $< e | r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) | e >= 1$ ， $< g | r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) | g >= 0$.这样 $\sum_{i=1}^{N} < r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) >$ 便是 N 个原子中处于激发态的原子数，而方程(7-19)恰是这些原子的总的线宽与位移. 若我们将(7-19)式两边用 $\sum_{i=1}^{N} < r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) >$ 规一化，并将规一化后的 $\frac{1}{2}\gamma + i\,\Delta\omega$ 用同样的符号表示

$$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega \;= \mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^{2} \frac{1}{\omega_{eg} \quad \omega_{\lambda} + \mathrm{i}\,s} +$$
$$\frac{\mathrm{i}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\Delta\vec{r}_j \neq 0} < r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_j) >}{\sum < r^{+}(\vec{r}_i) r \quad (\vec{r}_i) >} L(\Delta\vec{r}_j) \tag{7-20}$$
$$L(\Delta\vec{r}_j) = \sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^{2} \frac{1}{\omega_{eg} \quad \omega_{\lambda} + \mathrm{i}\,s} \mathrm{e}^{\;\mathrm{i}\vec{k}_{\lambda} \quad \Delta\vec{r}_j},$$
$$\Delta\vec{r}_j = \vec{r}_j \quad \vec{r}_i$$

式中第一项恰是单个原子的线宽与位移$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s$， 第二项为 N 个原子带来的修正. 函数 $L(\Delta\vec{r}_j)$ 可通过下式计算[109]

$$L(\Delta\vec{r}_j) = 2\gamma(K(\xi,\theta') \quad \mathrm{i}W(\xi,\theta')), \xi = \quad k_{\lambda}\Delta r_j$$
$$K(\xi,\theta') = \frac{3}{4}[\sin^2\theta' \frac{\sin\xi}{\xi} + (1 \quad 3\cos^2\theta')(\frac{\cos\xi}{\xi^2} \quad \frac{\sin\xi}{\xi^3})]$$
$$W(\xi,\theta') = \frac{3}{4}[\quad \sin^2\theta' \frac{\cos\xi}{\xi} + (1 \quad 3\cos^2\theta')(\frac{\sin\xi}{\xi^2} + \frac{\cos\xi}{\xi^3})] \tag{7-21}$$

式中 $|\vec{k}_{\lambda}| \approx 2\pi/\lambda$， λ 为原子的跃迁波长， θ' 是偶极矩 $\vec{\mu}_i$ 和 $\Delta\vec{r}_j$ 之间的夹角. 现在的主要问题是如何计算关联函数 $< r^{+}(\vec{r}_i) r^{-}(\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_j) >$. 由(7-17),(7-18)式得出

$$\begin{aligned} &< r^{+}(\vec{r}_i) r^{-}(\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_j) >= \\ &\qquad < r^{+}(\vec{r}_i) r^{-}(\vec{r}_i) >< \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e - \vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > \end{aligned} \tag{7-22}$$

因此, (7-20)式写为如下形式:

$$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\Delta\omega =$$
$$\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\Delta\omega_s + \sum_{\Delta\vec{r}_j} < \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e - \vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > L(\Delta\vec{r}_j) \tag{7-23}$$

用 $\Delta\vec{p}_e, \Delta\vec{p}_g$ 分别表示 $\vec{p}_e, \vec{p}_g$ 的热涨落，那么有 $\vec{p}_e = <\vec{p}_e> + \Delta\vec{p}_e$，$\vec{p}_g = <\vec{p}_g> + \Delta\vec{p}_g$．如果光子沿 $\hbar\vec{k}_L$ 方向入射，由于动量守恒，则有 $<\vec{p}_e> - <\vec{p}_g> = \hbar\vec{k}_L$．然而，如果光子沿两个相反的方向入射，有时吸收右光子有时吸收左光子，平均吸收的净光子动量是零，$<\vec{p}_e> - <\vec{p}_g> = 0$．因此，我们称前者为单边问题，相应于通过原子的散射光；而后者为双边问题，相应于原子各向同性的自发辐射（由电磁场的零点能诱导[114]）．下面首先讨论自发辐射情况，下列方程成立:

$$\begin{aligned} &< \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e - \vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > = < \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Delta\vec{p}_e - \Delta\vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > \approx \\ &< 1 + \frac{\mathrm{i}\Delta\vec{p}_e\cdot\Delta\vec{r}_j}{\hbar} - \frac{(\Delta\vec{p}_e\cdot\Delta\vec{r}_j)^2}{2\hbar^2} >< 1 - \\ &\frac{\mathrm{i}\Delta\vec{p}_g\cdot\Delta\vec{r}_j}{\hbar} - \frac{(\Delta\vec{p}_g\cdot\Delta\vec{r}_j)^2}{2\hbar^2} > \approx \\ &\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\Delta\vec{p}_e\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar)^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\Delta\vec{p}_g\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar)^2} = \\ &\mathrm{e}^{-2\pi(\Delta\vec{r}_j)^2/\lambda_B^2} \end{aligned} \tag{7-24}$$

式中 $\lambda_B = \sqrt{2\pi\hbar^2/mKT}$，在上式的推导中利用了 $\Delta\vec{p}_e/2m = \Delta\vec{p}_g/2m = KT/2$．进一步可假定在体积 $\lambda^3/2\pi^2$ 中有 $n = \rho 4\pi(\lambda/2\pi)^3$ 个原子, 则

$$\sum_{\Delta\vec{r}_j} < \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e-\vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > L(\Delta\vec{r}_j) =$$

$$\int \rho d\,\Delta\vec{r}_j L(\Delta\vec{r}_j)\,\mathrm{e}^{2\pi(\Delta\vec{r}_j)^2/\lambda_\mathrm{B}} =$$

$$\gamma n\int_0^\infty \xi^2\,\mathrm{d}\xi\int_0^\pi \sin\theta\mathrm{d}\theta\,\mathrm{e}^{-\xi^2/\xi_B^2}[K(\xi,\theta)-\mathrm{i}W(\xi,\theta)] = \tag{7-25}$$

$$2\gamma n(\gamma'+\mathrm{i}\delta'),$$

$$\xi_\mathrm{B} = \sqrt{2\pi}\lambda_\mathrm{B}/\lambda$$

$$\frac{1}{2}\varGamma_e + \mathrm{i}\,\Delta\omega = \frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s + \gamma n(\gamma'+\mathrm{i}\delta') \tag{7-26}$$

方程(7-26)给出 N 原子自发辐射跃迁几率为 $\varGamma_e$. N 个原子自发辐射的线宽与位移 $\frac{1}{2}\varGamma_e + \mathrm{i}\,\Delta\omega$ 恰是单原子的 $\frac{1}{2}\gamma_e + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s$ 加上增强项 $2\gamma n(\gamma'+\mathrm{i}\delta')$. 对于空间分布不均匀的大小为 a 的高斯分布，$n = n_0\,\mathrm{e}^{-\xi^2/a^2}$，上面的方程可以推广为

$$\sum_{\Delta\vec{r}_j} < \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e-\vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > L(\Delta\vec{r}_j) =$$

$$\gamma n_0\int_0^\infty \xi^2\,\mathrm{d}\xi\int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\times \tag{7-27}$$

$$\mathrm{e}^{-\xi^2/\xi_B^2-\xi^2/a^2}[K(\xi,\theta)-\mathrm{i}W(\xi,\theta)] =$$

$$2\gamma n_0(\gamma'+\mathrm{i}\delta')$$

对于单边问题, (7-24)、(7-25)式可类似地写为

$$< \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e-\vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} >=$$

$$< \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Delta\vec{p}_e-\Delta\vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_L\cdot\Delta\vec{r}_j} \tag{7-28}$$

$$\sum_{\Delta\vec{r}_j} < \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}_e - \vec{p}_g)\cdot\Delta\vec{r}_j/\hbar} > L(\Delta\vec{r}_j) =$$

$$\int \rho d\,\Delta\vec{r}_j\, L(\Delta\vec{r}_j)\,\mathrm{e}^{2\pi(\Delta\vec{r}_j)^2/\lambda_B + i\vec{k}_L\cdot\Delta\vec{r}_j} =$$

$$\gamma \int_0^\infty n\xi^2\,\mathrm{d}\xi \int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta \frac{1}{4\pi}\int\int \sin\theta_j\,\mathrm{d}\theta_j\,\mathrm{d}\phi_j \times$$

$$\mathrm{e}^{-\xi^2/\xi_B^2 - \mathrm{i}\xi\cos(\theta_j)}[K(\xi,\theta') - \mathrm{i}W(\xi,\theta')] = \tag{7-29}$$

$$\gamma n_0 \int_0^\infty \xi^2\,\mathrm{d}\xi \int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\, j_0(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/\xi_B^2 - \mathrm{i}\xi^2/a^2} \times$$

$$[K(\xi,\theta) - \mathrm{i}W(\xi,\theta)] =$$

$$2\gamma n_0(\gamma' + \mathrm{i}\delta')$$

这里$j_0()$表示球贝塞尔函数.在(7-29)式的推导中使用了下面的等式

$$\int_0^\pi \sin\theta\,\mathrm{d}\theta \frac{1}{4\pi}\int\int \sin\theta_j\,\mathrm{d}\theta_j\,\mathrm{d}\phi_j\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_L\Delta\vec{r}_j\cos(\theta_j)}\,P_m(\cos\theta') = \tag{7-30}$$

$$\mathrm{i}^m\, j_m(k_L\Delta r_j) P_m(\cos\theta)\delta_{0,m}$$

如图 7-1 中所示的角度$\theta',\theta_j,\theta,\phi_j$和$\phi$满足关系$\cos(\theta') = \cos(\theta_j)\cos(\theta) + \sin(\theta_j)\sin\theta\cos(\phi_j - \phi)$. 比较(7-27)和(7-29)式可以看出，两个方程都是通过高斯函数$\mathrm{e}^{-\xi^2/\xi_B^2 - \xi^2/a^2}$依赖于$\xi_B$ 和a（为简单，下面仍用$1/\xi_B^2$表示$1/\xi_B^2 + 1/a^2$），其差别仅在于(7-29)式中多了球贝塞尔函数$j_0()$. 为清楚，我们画出了γ',δ'随ξ_B的变化关系曲线，图 7-2 表示(7-27)式各向同性的自发辐射情形，(7-29)式的单边散射情形画在图 7-3 中.

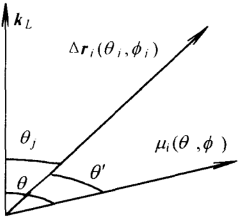


图 7-1 矢量 $\boldsymbol{k}_L$, $\Delta\boldsymbol{r}_j$ 和 μ_i的示意图

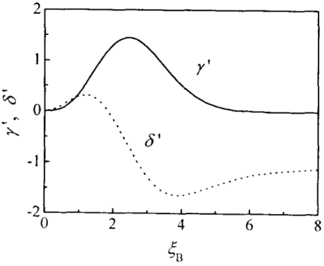


图 7-2 根据方程(7-14)画出的因子 γ', δ' 随 ξ_B 的变化关系

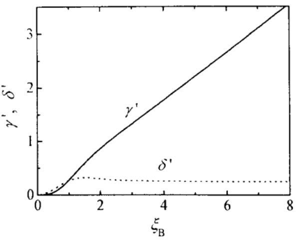


图 7-3　根据方程(7-16)画出的因子 γ'、δ' 随 ξ_B 的变化关系.

7.4 N 原子的受激跃迁速率

如果考虑原子的受激辐射，场算符作用于光子态$|n_\lambda>$得到

$$(b_\lambda^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t} - b_\lambda^- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t})|n_\lambda>= \sqrt{n_\lambda+1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\lambda t}|n_\lambda+1>- \sqrt{n_\lambda-1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\lambda t}|n_\lambda-1> \tag{7-31}$$

初始和中间态分别是$|e,n_\lambda>$，$|g,n_\lambda+1>$，$|g,n_\lambda-1>$. 类似演算导致由于自发辐射和受激辐射（$\propto n_\lambda$）引起的单原子的线宽和能级移动

$$\frac{1}{2}\gamma+\mathrm{i}\,\Delta\omega_s = \mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^2\left(\frac{n_\lambda+1}{\omega_{eg}-\omega_\lambda+\mathrm{i}s}+\frac{n_\lambda}{\omega_{eg}+\omega_\lambda+\mathrm{i}s}\right) \tag{7-32}$$

由(7-24)式并参考(7-20)式的推导，可以写出相应于 N 原子的公式

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\Gamma_e + \mathrm{i}\,\Delta\omega = \\
&\quad \mathrm{i}\sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^2 \left(\frac{n_\lambda + 1}{\omega_{eg} - \omega_\lambda + \mathrm{i}s} + \frac{n_\lambda}{\omega_{eg} + \omega_\lambda + \mathrm{i}s}\right) = \\
&\quad \frac{\mathrm{i}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\Delta\vec{r}_j \neq 0} \langle r^+(\vec{r}_i) r(\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_j)\rangle}{\sum \langle r^+(\vec{r}_i) r(\vec{r}_i)\rangle} L(\Delta\vec{r}_j) \\
&L(\Delta\vec{r}_j) = \sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^2 \left(\frac{n_\lambda + 1}{\omega_{eg} - \omega_\lambda + \mathrm{i}s} + \frac{n_\lambda}{\omega_{eg} + \omega_\lambda + \mathrm{i}s}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_\lambda \cdot \Delta\vec{r}_j} \approx \\
&\quad \sum_{\lambda,\sigma} g_{\lambda,\sigma}^2 \frac{n_\lambda + 1}{\omega_{eg} - \omega_\lambda + \mathrm{i}s} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_\lambda \cdot \Delta\vec{r}_j}
\end{aligned}
\tag{7-33}
$$

在热平衡状态下，按辐射系数 A_{12}, B_{12}, B_{21} 的爱因斯坦关系，可写下受激辐射的跃迁几率与吸收几率分别为:

$$
\begin{aligned}
&B_{21}\frac{\hbar\omega_\lambda^3}{\pi^3 c^3} n_\lambda N_2 = A_{21} n_\lambda N_2 = \\
&\quad 2\left[\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s + \gamma m(\gamma' + \mathrm{i}\delta')\right] n_\lambda N_2 \\
&B_{12}\frac{\hbar\omega_\lambda^3}{\pi^3 c^3} n_\lambda N_1 = A_{21} n_\lambda N_1 = \\
&\quad 2\left[\frac{1}{2}\gamma + \mathrm{i}\,\Delta\omega_s + \gamma m(\gamma' + \mathrm{i}\delta')\right] n_\lambda N_1
\end{aligned}
\tag{7-34}
$$

N_1， N_2 分别为基态、激发态的原子数， n_λ 是模式 λ 的平均光子数.

7.5 数值结果及与文献结果的比较

7.5.1 数值结果

参照各向同性的自发辐射情况的图 7-2，增强因子γ'在$\xi_B=2.45$有极大值$\gamma'=1.453$，然后当ξ_B趋于很大时,衰减到零,并且能级移位因子δ'趋于-1.0．将典型的钠原子凝聚体的数据[103]，$m=23\times1.67\times10^{-24}$g，$\lambda=589$nm, $\rho=10^{14}\,\text{cm}^{-3}$, $T=2\,\mu$K,代入$\xi_B=\sqrt{2\pi}\lambda_B/\lambda=2\pi\sqrt{\dfrac{\hbar^2}{mKT}}/\lambda$,$n=\rho\lambda^3/(2\pi^2)$，我们得到$\xi_B=0.434<2.45$，$n=1.035$，因此，以2γ为单位的增强因子,$n(\gamma'+i\delta')=0.0355+i0.1136$．然而，若将温度降至 $0.0627\,\mu$K，此时$\xi_B=2.45$，增强因子达于极大值$n(\gamma'+i\delta')=1.505+i0.711$．图 7-3 给出了(7-29)式单边光散射情形的类似结果，当ξ_B较大时，辐射速率的增强γ'随ξ_B几乎线性地增加，位移修正δ'减小到较小的值.

7.5.2 与 You 的解[48]的关系

参照文献[48]，我们忽略原子的热运动，$\Delta\boldsymbol{p}_e=\Delta\boldsymbol{p}_g=0$，并采用 on-shell 近似，对单边问题 $|\boldsymbol{k}_\lambda|=|\boldsymbol{k}_L|$，由$\left(\dfrac{1}{2}\Delta\Gamma_e+\mathrm{i}\,\Delta\omega\right)_{en}$表示的方程(7-20)的第二项，简化为

$$\left(\frac{1}{2}\Gamma_e+\mathrm{i}\,\Delta\omega\right)_{en}=\frac{\mathrm{i}\sum_{l=1}^{N}\sum_{\Delta\vec{r}_j\neq0}<r^+(\vec{r}_i)r^-(\vec{r}_i+\Delta\vec{r}_j)>}{\sum_{l=1}^{N}<r^+(\vec{r}_i)r^-(\vec{r}_i)>}=$$

$$\mathrm{i}\frac{\sum_\sigma g_{\sigma,\lambda}^2}{\omega_{eg}-\omega_L+\mathrm{i}s}\int\rho(\Delta\vec{r}_j)(\Delta\vec{r}_j)^2\,\mathrm{d}\,\Delta\vec{r}_j\times$$

$$
\begin{aligned}
&\iint \mathrm{d}\cos\theta_j \, \mathrm{d}\phi_j \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}_L-\vec{k}_\lambda)\cdot\Delta\vec{r}_j} = \\
&(\frac{1}{2}\gamma+\mathrm{i}\,\Delta\omega_s)\int\rho(\Delta\vec{r}_j)(\Delta\vec{r}_j)^2\,\mathrm{d}\,\Delta\vec{r}_j\times \\
&\iint \mathrm{d}\cos\theta_j\,\mathrm{d}\phi_j\sum \mathrm{i}^n(2n+1)\times \\
&j_n(k_L\Delta r_j)P_n(\cos\theta_j)\times \\
&\sum(-\mathrm{i})^m(2m+1)j_m(k_\lambda\Delta r_j)P_m(\cos\gamma)= \\
&(\frac{1}{2}\gamma+\mathrm{i}\,\Delta\omega_s)4\pi\int\rho(\Delta\vec{r}_j)(\Delta\vec{r}_j)^2\,\mathrm{d}\,\Delta\vec{r}_j\times \\
&\sum(2n+1)j_n^2(k_L\Delta r_j)P_n(\cos\theta)
\end{aligned}
\tag{7-35}
$$

其中 $\cos\gamma=\cos\theta\cos\theta_j+\sin\theta\sin\theta_j\cos(\phi-\phi_j)$. 应用类似于 You 论文[48]中的记法

$$
\frac{1}{2}\gamma_{L,n}=4\pi(\frac{1}{2}\gamma+\mathrm{i}\,\Delta\omega_s)\int\rho(\Delta\vec{r}_j)(\Delta\vec{r}_j)^2\,\mathrm{d}\,\Delta\vec{r}_j\,j_n^2(k_L\Delta r_j)
\tag{7-36}
$$

这样，N 原子散射辐射的增强 $(\frac{1}{2}\Delta\Gamma_e+\mathrm{i}\,\Delta\omega\ )_{en}$ 可被表示为

$$
(\frac{1}{2}\Delta\Gamma_e+\mathrm{i}\,\Delta\omega\ )_{en}=\sum\frac{2n+1}{2}\gamma_{L,n}P_n(\cos\theta)
\tag{7-37}
$$

这个方程等价于 You 论文[48]中的(51), (54), (56)和(57)式. 从方程(7-36)和(7-37)的推导，我们得出 You 的关于光散射的论文属于单边问题, 除了 on-shell 近似和两个前面提到的假定以外[48],得到上述散射截面增强的最重要的原因是忽略了原子的热运动，而我们的属于双边问题的自发辐射解(7-27)包括原子的热运动，也不需要 on-shell 近似和两个假定.

7.6 小 结

本章给出一准确求解 N 原子辐射几率的模型，所求得的自发与受激跃迁几率的增强因子正比于 $\lambda^3/(2\pi^2)$（λ 为原子的跃迁波长)体积内的原子数 n，并依赖于德布罗意波长 λ_B．即当 λ_B 与原子的跃迁波长 λ 之比 $\xi_B=\sqrt{2\pi}\,\lambda_B/\lambda=\hbar k_L/\sqrt{mkT}=2.45$ 时，辐射速率的增强因子 δ' 达到它的极大值，当 $kT\to 0$，$\xi_B\to\infty$ 时，增强因子 δ' 趋于零．另一方面，当 $\xi\to 0$ 时，Lamb 移位的修正 δ' 趋于零；当 $\xi\to\infty$ 时，δ' 趋于一个有限值．

第八章　结论和展望

本文简要回顾了 BEC 研究的历史，介绍了实现 BEC 的相关技术和碱金属原子和氢原子 BEC 的主要实验结果和近几年 BEC 的理论研究工作，较详细地介绍和总结了理想气体的玻色-爱因斯坦凝聚的性质和规律. 这些都是我们开展非理想气体 BEC 性质理论研究的基础.

我们计算了一维箱势中有排斥和吸引相互作用中性原子体系的波函数和能量的本征解析解，给出了解有相互作用情形中性原子玻色 - 爱因斯坦凝聚的一般方法，估算了这种非理想气体 BEC 的临界温度随原子间相互作用大小和原子密度的变化情况，得出随着凝聚原子数的增加或原子间相互作用强度的增大，临界温度 T_c 升高.

根据波函数归一化和收敛条件，给出了非线性定态薛定谔方程数值求解的一种方法，并求解了简谐势阱中具有排斥相互作用中性原子体系的非线性定态薛定谔方程基态和激发态解. 由三维球方势和简谐势阱中具有吸引相互作用原子体系 NLSE 的数值本征解，得到类似的特性，即原子的空间分布随相互作用的增强而被连续压缩，以及凝聚原子数随能量本征值变化的双稳态曲线，由此得到与实验报道相符的吸引 BEC 所能包含的最大原子数 N_c. 对每一个 $N < N_c$ 存在一个亚稳凝聚态和相应同一原子数的不稳的稠

密态. 在临界点附近亚稳凝聚可以很容易通过宏观量子隧道而进入塌缩态; 然而, 远离临界点时, 凝聚体应是相当稳定的.

根据最近的 BEC 的动力学模型, 用母函数方法求得玻色凝聚体主方程的解, 并计算了凝聚体形成的增率与起伏, 增率曲线存在一平台, 而平台的粒子数起伏则是超泊松分布的. 初始增率 γ 随最终平衡时凝聚原子数 n_{eq} 的增加而逐步减小, 与实验结果大体上一致.

最后, 给出了 BEC 原子辐射几率准确求解模型, 求得玻色-爱因斯坦凝聚体的自发与受激跃迁几率的增强因子正比于 $\lambda^3/(2\pi^2)$ (λ 为原子的跃迁波长)体积内的原子数 n, 并依赖于德布罗意波长 λ_B.

关于 EBC 形成的动力学、原子光学、非线性原子光学等方面的研究方兴未艾. 在原子光学方面, 凝聚体作为相干物质波的干涉、衍射效应, 光波对物质波的散射等都需要做进一步的实验和理论研究. 原子激光的相干特性的研究指出, 宏观数量的原子处于同一量子态表明凝聚体是高度相干的, 但它们处于捕陷状态, 凝聚体的相位和振幅都是很简单的, 不像光学腔中复杂的相干性质. 另一个就是耦合输出后波的相干性质, 由于光子之间的相互作用可以忽略, 光波近似在自由空间中传播. 原子激光情况就十分不同了, 因为原子间有不可忽略的原子间相互作用, 耦合输出的凝聚体的相干性质就非常不同于捕陷凝聚体的特性, 特别是它们的高阶相干函数. 文献[57]根据双光子 Raman 散射技术(一级 Bragg 衍射)产生了高度准直的原子激光. 在此之后, 物质波放大装置的研究就是一个重要课题. 物质波干涉

仪是获取高相干效率的装置，也是获知凝聚体振幅和相位信息的一种理想工具. 还有一种物质波的相位相干放大装置，其过程依赖于物质波的超辐射效应. 这是自发辐射过程导致自放大的相干过程. 原子激光的实现将进一步拓展物理学的一个新的研究领域——非线性原子光学. 由于物质波满足的 GP 方程中的非线性项有类似于 Kerr 型相互作用项， 物质波也应有相应于非线性光学中的三阶非线性效应被观察到, 如物质波的多波混频等. 在一定条件下由 GP 方程可以推出孤立物质波的存在, GP 方程也支配着孤立波的传播，排斥的原子间相互作用仅维持暗孤子的传播. 高度准直、准连续的可调原子激光为用强物质波源进行实验提供了可能性. 另外关于 EBC 的形成的动力学特性还不能很好地被理解，特别是凝聚的初始生长阶段；连续高亮度的原子激光实现的理论和实验技术；EBC 的激发以及依据平均场的各种非线性效应的研究. 将来更多的宏观量子态特性的实验必将推动玻色系统多体理论，特别是非均匀玻色系统理论的发展；同时理论和实验研究都将会为这种新物态开拓新的应用领域.

参 考 文 献

1 Anderson M.H., Ensher J.R., Methews M. R., *et al*. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 1995; **269** (5221) : 198

2 Davis K.B., Mewes M.-O., Andrews M.R., *et al*. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 1995; **75** (22) : 3969

3 Bradley C. C., Sackett C. A., Tollett J. J., *et al*. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 1995; **75** (9), 1687

4 Dale G. Fried, Thoms C. Killian, Lorenz Willmann, *et al*. Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen. *Phys. Rev. Lett.*, 1998; **81**(18) : 3811

5 郝柏林. 中性原子的玻色-爱因斯坦凝聚. 物理学进展, 1997; **17** (3) : 223

6 Blanpied W.A. Satgendranath Bose: co-founder of quantum statistics. *Am. J. Phys*. 1972; **40**(9) : 1212

7 Bose S. N. The Planck law and the hypothesis. *Z. Phys*. 1924; **26** (2) : 178

8 Einstein A. *Sitzungsber. Klg. Preuss Akad.* **1924** (1924) : 261; **1925** (1925) : 3

9 Hecht C. E. The possible superfluid behaviour of hydrogen atom gases and liquids. *Physica*. 1959; **25**(12) : 115

10 Hulin D., Mysyriwucz A., Guillaume C. B. Evidence for Bose-Einstein statistics in an exciton gas. *Phys. Rev. Lett*. 1980; **45** : 1970

11 Lin J. L., Wolfe J. P. Bose-Einstein condensation of paraexcitons in stressed Cu_2O. *Phys. Rev. Lett.* 1993; **71**(8) : 1222

12 谭维翰. 非线性和量子光学. 北京: 科学出版社, 1996

13 王晓辉, 李义民, 王义遒. 玻色-爱因斯坦凝聚的物理实现及其应用展望. 物理, 1998; **27**(1) : 3

14 Migdall A., Bergemen T., Phillips W. D., *et al.* First obervation of magnetically trapped netral atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 1985; **54** (24) : 2596

15 Petrich K. W., Anderson M. H., Ensher J. R., *et al.* Stable, tightly confining magnetic trap for evaporative cooling of neutral atom. *Phys. Rev. Lett.*, 1994; **74** (22) : 3352

16 Pritchard O.E. Cooling neutral atoms in a magnetic trap for precision spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 1983; **51** (15) : 1336

17 Mewes M. O., Anderson M. R., van Druten N. J., *et al.* Bose-Einstein condensation in a tightly confining dc magnetic trap. *Phys. Rev. Lett.*, 1996; **77** (3) : 416

18 John M.D., Jon C.S., Ite A.Y., *et al.* Hydrogen in the submilliKelvin regime : sticking probability on superfluid ^{4}He. *Phys. Rev. Lett.*, 1991; **67** (5) : 603

19 Ensher J.R., Jin D.S., Matthews M.R., *et al.* Bose-Einstein condensation in a dilute gase : measurement of energy and ground-state occupation. *Phys. Rev. Lett.*, 1996; **77** (25) : 4984

20 王义遒. 原子的激光冷却和捕陷. 物理, 1990; **19** (7): 389; **19** (8) : 449

21 Ketterle W., Davis K. B., Joffe M. A., *et al.* High desities of cold atoms in a dark spontaneous-force optical trap. *Phys. Rev. Lett.*,

1993; **70** (15) : 2253

22 Lene vestergaard Hau, Busch B. D., Liu C., *et. al*. Near-resonant images of confined Bose-Einstein condensates in a 4-Dee magnetic bottle. *Phys. Rev.* 1998; **A58** (1) : R54

23 Bradley C. C., Sacket C. A., Hulet R. G. Bose-Einstein condensation of Lithium: observation of limited condensate number. *Phys. Rev. Lett.*, 1997; **78** (6) : 985

24 Yu I.A., Doyle J.M., Sandberg J.C., *et. al*. Evidence for universal quantum reflection of hydrogen from liquid ^{4}He. *Phys.Rev.Lett.* 1993; **71** (10) : 1589

25 李师群，吕亚军，黄湖. 玻色-爱因斯坦凝聚(BEC)及其光学性质的研究. 量子电子学报, 1997; **14** (1) : 1

26 Kagan Yu., Shlyapnikov G. V., Waltraven J. T. M. Bose-Einstein condensation in trapped atomic gases. *Phys. Rev. Lett.*, 1996; **76** (15) : 2670; Kagan Yu., Muryshev A. E., Shlyapnikov G. V. Collapse and Bose-Einstein condensation in a trapped Bose gas with negative scattering length. *Phys. Rev. Lett.* 1998; **81** (5) : 933

27 Huang K. Statistical Mechanics. New York: John Wiley sons, 1987

28 Ueda M., Leggett A. J. Macroscopic quantum tunneling of a Bose-Einstein condensation with attractive interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 1998; **80** (8) : 1576

29 Dodd R. J., Edwards M., Williams C. J., *et. al*. Role of attractive interactions on Bose-Einstein condensation. *Phys. Rev.* 1996; **A54** (1) : 661

30 Shuryak E.V. Metastable Bose condensate made of atoms with attractive interaction. *Phys. Rev.* 1996; **A54** (4) : 3151

31 Levich E., Yakhot V. Time evolution of a Bose system passing

through the critical point. *Phys. Rev.* 1977; **B15** (1) : 243

32 Snoke D. W., Wolfe J. P. Population dynamics of a Bose gas near saturation. *Phys. Rev.* 1989: **B39** (7) : 4030

33 Semikoz D. V., Tkachev I. I. Kinetics of Bose condensation. *Phys. Rev. Lett.*, 1995; **74** (16) : 3093

34 Stoof H.T.C. Formation of the condensate in a dilute Bose gas. *Phys. Rev. Lett.* 1991; **66** (24) : 3148

35 Stoof H. T. C. Initial stage of Bose-Einsein condensation. *Phys. Rev. Lett.* 1997; **78** (5) : 768

36 Kagan Yu., Svistunov B.V., Shlyapnikov G.V. Erratum: kinetics of Bose condensation in an interacting Bose gas. *Sov. Phys. JETP* 1992; **75** (2) : 387

37 Kagan Yu., Svistunov B.V. Evolution of correlation properties and appearance of broken symmetry in the process of Bose-Einstein condensation. *Phys. Rev. Lett.*, 1997; **79** (18) : 3331

38 Gardiner C.W., Zoller P., Ballagh R. J., *et al.* Kinetics of Bose-Einstein condensation in a trap. *Phys. Rev. Lett.*, 1997; **79** (10) : 1793

39 Miesner H. –J., Stamper-Kurn D. M., Andrews, *et al.* Bosonic stimulation in the formation of a Bose-Einstein condensation. *Science*, 1998; **279** (5353) : 1005

40 Pitaevskii L. P. *Sov. Phys. JETP,* 1961; **13** : 451

41 Fetter A. L. Nonuniform states of an imperfect Bose gas. *Ann. Phys.* (N.Y.) 1972: **70** (1) : 67; *Phys. Rev.* 1996; **A53** (6) : 4245.

42 Edwards M., Dodd R. J., Clark C. W., *et al.* Properties of a Bose-Einstein condensate in an anisotropic harmonic potential. *Phys. Rev.*,

1996; **A53**(4) : R1950; Edwards M., Ruprecht P. A., Burnett *et al.* Collective excitation of atomic Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 1996; **77** (9) : 1671

43 Fetter A. L., Roshsar D. Excited sates of a dilute Bose-Einstein condensate in a harmonic trap. *Phys. Rev.* 1998; **A57** (2) : 1191

44 Politzer H. D. Light incident on a Bose-condensed gas. *Phys. Rev.* 1991; **A43** (11) : 6444

45 Lewenstein M., Li You. Probing Bose-Einstein condensed with short laser pulse. *Phys. Rev. Lett.*,1993; **71** (9) : 1339

46 Li You, Lewenstein M., Cooper J. Quantum field theory of atoms interacting with photons. II. Scattering of short laser pulse from trapped bosonic atoms. *Phys. Rev.*,1995; **A51** (6) : 4712

47 Li You, Lewenstein M., Cooper J. Line shapes for scattering from Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev.*, 1994; **A50** (5) : R3565

48 Li You, Lewenstein M., Glauber R., *et al.* Quatum field theory of atoms interacting with photons. III. Scattering of weak cw light from cold samples of bosonic atoms. *Phys. Rev.* 1996; **A53** (1) : 329

49 Lewenstein M., Li You, Cooper J., *et al.* Quatum field theory of atoms interacting with photons: foundations. *Phys. Rev.*, 1994; **A50** (3) : 2207

50 Javanainen J. Optical signatures of a tightly confined Bose condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 1994; **72** (15) : 2375

51 Javanainen J., Ruostekoski J. Off resonance light scattering from low-temperature Bose and Fermi gases. *Phys. Rev.*, 1995; **A52** (4) : 3033

52 Javanainen J. Spectrum of light scattering from a degenerate Bose

gas. *Phys. Rev. Lett.*,1995; **75** (10) : 1927

53 Hope J. J., Savage C. M. Stimulated enhancement of cross section by a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev.*,1996; **A54** (4) : 3177

54 Huang H., Wang D. Z. L., Chang, Li S. Q. Lamb shift of absorptive resonance in a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*,1997; **79** (16) : 2923

55 Cirac J. I., Lewenstein M., Zoller P. Quantum statistics of a laser cooled ieal gas. *Phys. Rev. Lett.*, 1994; **72** (19) : 2977; Cirac J. I., Lewenstein M., Zoller P. Quantum dynamics of a laser-cooled ideal gas. *Phys. Rev.*,1994; **A50** (4) : 3409

56 Hiroshim T., Yamamoto Y. Nonlinear optical response of cold atoms. *Phys. Rev.*,1996;**A53** (2) : 1048

57 Hagley E. W.,Deng L., Kozuma M., *et al.* A well-collimated quasi-continuous atom laser. *Science*, 1999; **283** (5408) : 1706

58 Deng l., Hagley E. W., Wen J., *et al.* Four-wave mixing with matter waves. *Nature*, 1999; **398** (6724) : 218

59 Mewes M. O., Andrews M. R., Kurn D. M., *et al.* Output coupler for Bose-Einstein condensed atoms. *Phys. Rev. Lett.*,1997; **78** (4) : 582

60 Holland M.Burnett K., Gardiner C. Theory of an atom laser. *Phys. Rev.* 1996; **A54** (3) : 1757; Wiseman H., Martins A., Walls D. An atom laser based on evaporative cooling. *Quantum Semicalss. Opt.*,1996; **8** (3) : 737

61 Ziff R. M., Uhlenbeck G. E., Aac M. The ideal Bose-Einstein gas, revisited. *Phys. Rep.*,1977; **32**(4) : 169

62 Bagnato V., Pritchard D.E., Kleppner D. Bose-Einstein condensation in a external potential. *Phys. Rev.*,1987; **A35** (10) : 4354

63 Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, L.P., Pitaevskii, *et al.* Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*,1999; **71** (3) : 463

64 Ketterle W., van Druten N. J. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. *Phys. Rev.*, 1996; **A54** (1) : 656

65 Grossmann S., holthaus M. On Bose-Einstein condensation in harmonic traps. *Phys. Lett.*,1995; **A208** (3) : 188; Kiesten K., Toms D. J. Bose-Einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator. *Phys. Rev.*, 1996; **A54** (5) : 4188

66 Haugerud H., Haugset T., Ravndal F. Amore accurate analysis of Bose-Einstein condensation in harmonic trap. *Phys. Lett.*, 1997; **A225** (1) : 18

67 Hohenberg P. C. Existence of long range order in one and two dimensions. *Phys. Rev.*,1967; **158** (2) : 383

68 Mullin W. J., J. Low. *Temp. Phys.*,1997; **106** : 615

69 Bagnato V., Kleppner D. Bose-Einstein condensation in low-dimensional traps, *Phys. Rev.*,1991; **A44** (11) : 7439

70 Ketterle W., Pritchard D. E. Atom cooling by time-dependent potentials, *Phys. Rev.*, 1992; **A46** (7) : 4051

71 Pinkse P. W., Mosk A., Weidemuller M., *et al.* Adiabatically changing the phase-space density of a trapped Bose gas. *Phys. Rev. Lett.*, 1997; **78** (6) : 990

72 Stamper-Kurn D.M., Miesner H.-J., Chikkatur A.P., *et al.* Reversible formation of a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 1998; **81** (11) : 2194

73 Bogoliubov N. On the theory of superfluidity. *J. Phys.* (U.S.S.R.) 1947: **11** (1) : 23

74 谭维翰，闫珂柱．解有排斥相互作用中性原子的玻色－爱因斯坦凝聚的一般方法．物理学报，1999; **48** : 1983

75 倪光炯．高等量子力学．上海：复旦大学出版社，2000

76 Toyoda T. A microscopic theory of the lambda transition. *Ann. Phys.* (*N.Y.*), 1982; **141** (1) :154

77 Gruter P., Ceperley D., Laloe F. Critical temperature of Bose-Einstein condensation of hard-sphere gases. *Phys. Rev. Lett.*,1997; **79** (19) : 3549

78 Holzmann M., Gruter P., Laloe F. *Eur. Phys. J.*,1999; **B10** : 239

79 Huang K. Transition temperature of a uniform imperfect Bose gase. *Phys. Rev. Lett.*, 1999; **83** (19) : 3770

80 Giorgini S., Pitaevskii L., Stringari S. Condensate fraction and critical temperature of a trapped interacting Bose gas. *Phys. Rev.*, 1996; **A54** (6) : R4633

81 王竹溪．统计物理导论．北京：高等教育出版社，1956: 279

82 Landau L. D., Lifshitz E. M. *Quantum Mechanics* (English edition), London: Pergamon Press, 1958: 55

83 Milton Abramowitz, Irene A. Stegun. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables, 4th printing, Washington, D. C., U. S. Government Printing Office, 1965: 567

84 Chou T.T., Yang Chen Ning. Yu L. H. Bose-Einstein condensation of atoms in a trap. *Phys. Rev.*,1996: **A53** (6) : 4257

85 Chou T. T., Yang Chen Ning, Yu L. H. Momentum distribution for

bosons with positive scattering length in a trap. *Phys. Rev.*,1997; **A55** (2) : 1179

86 Huang Kerson. Yang Chen Ning. Quantum-mechanical many-body problem with hard-shere interaction. *Phys. Rev.* ,1957; **105** (3) : 767

87 Edwards M., Burnett K. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms. *Phys. Rev.*, 1995; **A51**(2) : 1382

88 Ruprecht P. A., Holland M., Burnett J.K., *et al.* Time-dependent solution of the nonlinear Schrödinger equation for Bose-condensed trapped neutral atoms. *Phys. Rev.*, 1995; **A51**(6) : 4704

89 闫珂柱，谭维翰. 简谐势阱中中性原子的非线性薛定格方程的定态解. 物理学报, 1999; **48** (11) : 1185

90 Lifshitz E. M., Pitaevskii L.P. *Statistical Physics* Part 2, Pergamon Press Ltd, 1980

91 Stoof H. T. C. Atomic Bose gas with a negative scattering length. *Phys. Rev.*, 1994; **A49** (5) : 3824

92 Stoof H. T. C. Macroscopic quantum tunneling of a Bose condensate. *J. Stat. Phys.* , 1997; **87**(5/6) : 1353

93 闫珂柱，谭维翰. 箱势中有吸引相互作用的中性原子体系的非线性薛定谔方程的严格解. 量子光学学报，2000; **6** (4)

94 闫珂柱，谭维翰. 有吸引相互作用中性原子的玻色－爱因斯坦凝聚. 物理学报, 2000; **49** (10)

95 Yan Kezhu. Tan Weihan. A Model for Macroscopic Quantum Tunneling of a Bose Condensate with Attractive Interaction. *Chin. Phys. Lett.*, 2000; **17** (9) : 631

96 Gribakin G. F., Flambaum V. V. Calculation of the scattering length

in atomic collisions using the semiclassical approximation. *Phys. Rev.*, 1993; **A48** (1) : 546

97 Côté R., Dalgarno A., Jamieson M. J. Elastic scattering of two ^{7}Li atoms. *Phys. Rev.*, 1994; **A50** (1) : 399

98 Abraham E.R., McAlexander W.I., Sackett C.A., *et al.* Spectroscopic determination of the s-wave scattering length of Lithium, *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **74** (8) : 1315

99 Huepe C., Metens S., Dewel G., *et al.* Decay rates in attractive Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 1999; **82** (8) : 1616

100 Sackett C. A., Stoof H. T. C., Hulet R. G. Growth and collapse of a Bose Einstein condensate with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 1998; **80** (10) : 2031

101 Gardiner C. W., Lee M. D., Ballagh R. J., *et al.* Quantum kinetic theory of condensate growth: comparison of experiment and theory. *Phys. Rev. Lett.*, 1998; **81** (24) : 5266

102 Gardiner C. W., Zoller P. Quantum kinetic theory. III. Quantum kinetic master equation for strongly condensed trapped systems. *Phys. Rev.*, 1998; **A58** (1), 536.

103 Tan Weihan. The exact solution to the regular pump model of photon noise reduction in lasers. *Physics Letters*, 1994; **A190** (1) : 13

104 Tan Weihan. The general process in lasers. *Opt. Commu.*, 1995; **115** (3/4) : 303

105 Yan Kezhu, Tan Weihan. The Growth Rate and Statistical Fluctuation of Bose-Einstein Condensate Formation. *Chin. Phys.*, 2000; **16**(7) : 485

106 Gardiner C. W. Partocle-number-conserving Bogoliubov method which demonstrates the validity of the time-dependent Gross-Pitaevskii equation

for a highly condensed Bose gas. *Phys. Rev.*, 1997; **A56** (2) : 1414

107 Svistunov V., Shlyapnikov G. V. Resomance optics of the low-temperature H and D quantum gases. *Sov. Phys. JETP*, 1990; **70** : 640; Effects of Bose condensed on resonance optics in the H gas. *Sov. Phys. JETP*, 1990; **71** : 71

108 Ruostekoski J., Javanainen J. Quantum field theory of cooperative atom response: low light intensity. *Phys. Rev.*, 1997; **A55** (1) : 513

109 J.R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Non-relativisitic Collisions* New York: Wiley, 1987

110 Glauber R.J. in Lectures in Theoretical Physics,edited by W.E.Brittin and L.G. Dunham (Interscience, New York,1959) Vol.I: 315

111 Tan Weihan, Yan Kezhu, Liu Renhong. The enhancement of spontaneous and induced transition rates by a Bose-Einstein Condensate. *J. Mod. Opt.*, 2000; **47**(10) : 1729

112 Barbara Goss Levi. At long last, a Bose-Einstein condensate is formed in hydrogen. *Phys. Today*, 1998; Oct : 17

113 Weisskopf V. G., Wigner E. *Phys.*, 1930; **63**: 54; Louisell W.H. Quantum Statistical Properties of Radiation, 285 (John Wiley and Sons, Inc., 1990); Lehmberg R.H. *Phys. Rev.* 1970; **A2**: 883

114 Schiff L.I. *Quantum Mechanics* (Third Edition), New York : McGraw-Hill, 1968:533

致 谢

在本论文完成之际，谨向导师谭维翰研究员、周世平教授表示衷心感谢．特别感谢谭维翰先生，在研究工作中的精心指导和严格要求，生活上的无微不至的关心．他耿直、向上的人格，对科学的执着追求，踏踏实实的工作作风，将会深深影响我以后的工作和学习．

感谢章介伦教授在学习和工作中给予的帮助．

感谢范薇、陆宏伟、汪军民等同学在学习和工作中的帮助．

感谢我的妻子李蕾女士一直给予的支持：关心和长期对家庭的付出．

作者，二〇〇〇年十月于上海大学